



Diplomarbeit

Simulation der Beanspruchung von Behältern für Phasenwechselmaterialien mit strukturmechanischen Finiten Elementen

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines Master of Science (MSc) eingereicht an der TU Wien, Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften, von

Christoph König

Mat.Nr.: 1425864

unter der Leitung von

Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Franz Rauscher

Institut für Konstruktionswissenschaften und Produktentwicklung, E307-04

Wien, September 2021

Ich nehme zur Kenntnis, dass ich zur Drucklegung dieser Arbeit nur mit Bewilligung der Prüfungskommission berechtigt bin.

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass die vorliegende Arbeit nach den anerkannten Grundsätzen für wissenschaftliche Abhandlungen von mir selbstständig erstellt wurde. Alle verwendeten Hilfsmittel, insbesondere die zugrunde gelegte Literatur, sind in dieser Arbeit genannt und aufgelistet. Die aus den Quellen wörtlich entnommenen Stellen, sind als solche kenntlich gemacht.

Das Thema dieser Arbeit wurde von mir bisher weder im In- noch Ausland einer Beurteilerin/einem Beurteiler zur Begutachtung in irgendeiner Form als Prüfungsarbeit vorgelegt. Diese Arbeit stimmt mit der von den Begutachterinnen/Begutachtern beurteilten Arbeit überein.

Ich nehme zur Kenntnis, dass die vorgelegte Arbeit mit geeigneten und dem derzeitigen Stand der Technik entsprechenden Mitteln (Plagiat-Erkennungssoftware) elektronisch-technisch überprüft wird. Dies stellt einerseits sicher, dass bei der Erstellung der vorgelegten Arbeit die hohen Qualitätsvorgaben im Rahmen der geltenden Regeln zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis "Code of Conduct" an der TU Wien eingehalten wurden. Zum anderen werden durch einen Abgleich mit anderen studentischen Abschlussarbeiten Verletzungen meines persönlichen Urheberrechts vermieden.

Stadt und Datum

Unterschrift

Kurzfassung

Ziel dieser Masterarbeit ist es, das Verhalten von Phasenwechselmaterialien (PCM) während des Erstarrens und Schmelzens durch die Wahl von geeigneten Werkstoffmodellen zu simulieren. Dabei sollen nach Möglichkeit Effekte wie die Spaltbildung zwischen Behälter und Phasenwechselmaterial und die mechanischen Eigenschaften von festem Phasenwechselmaterial berücksichtigt werden und das Verhalten einer Flüssigkeit angenähert werden. Aufgrund der großen Schrumpfung beim Erstarren kommt es dabei im Phasenwechselmaterial zur Bildung von Vakuumeinschlüssen (Lunker). Dadurch kommt es beim erneuten Schmelzen des PCM und den damit verbundenen Wärmeausdehnungen zu Belastungen im Behälter.

Hintergrund der Arbeit ist, dass Phasenwechselmaterialien zum Speichern von Wärme benötigt werden, da diese am Schmelzpunkt eine große Wärmemenge bei konstanter Temperatur abgeben. Die mit Phasenwechselmaterialien gefüllten Behälter sollen dabei auf Dampfspeicher montiert werden, um die Druck- und Temperaturschwankungen während der Dampfabgabe zu verringern und die speicherbare Wärmemenge zu erhöhen.

Die dafür benötigten Werkstoffkennwerte wurden, wenn möglich, aus der Literatur entnommen. Für Werkstoffkennwerte, für die keine Zahlenwerte vorhanden waren, wurden die Werte abgeschätzt.

Zur Simulation werden strukturmechanische Finite Elemente aus Standardsoftware verwendet. Diese sind allerdings nicht in der Lage das Verhalten von Flüssigkeiten ausreichend genau zu beschreiben. Es können lediglich die Festigkeitskennwerte im flüssigen Zustand so weit abgesenkt werden, bis ein gelartiges Verhalten entsteht. Außerdem kann ein Schmelzpunkt nicht dargestellt werden. Daher findet das Erstarren und Schmelzen innerhalb eines Temperaturintervalls statt.

In der Arbeit werden dazu vier Werkstoffmodelle vorgestellt, welche in der Lage sind, das Verhalten des Phasenwechselmaterials teilweise zu beschreiben. Aufgrund der Tatsache, dass für Phasenwechselmaterialien nur wenige Werkstoffkennwerte bekannt sind, war eine zusätzliche Anforderung an die Werkstoffmodelle, dass diese möglichst wenige Parameter benötigen. Deswegen wurde eines der vorgestellten Werkstoffmodelle ausgeschlossen. Es wurde kein Werkstoffmodell gefunden, welches in der Lage ist, das vollständige Verhalten von Phasenwechselmaterial zu beschreiben. Für die ausgewählten Werkstoffmodelle wurden anschließend die Werkstoffparameter festgelegt und Simulationen an einfachen Behältern durchgeführt und die Ergebnisse diskutiert.

Abstract

The aim of this master thesis is to simulate the behavior of phase-change-materials (PCM) during solidification and melting by choosing suitable material laws. Where possible, effects such as the gap formation between the container and the phase-change-material and the mechanical properties of solid phase-change-material are to be taken into account. Due to the large thermal shrinkage during solidification, vacuum inclusions are formed in the phase-change-material. This leads to stresses in the container when the PCM is remelted and the thermal expansions occur.

The background of this thesis is that phase-change-materials are needed to store heat, as they release a large amount of heat at the melting point at a constant temperature. The containers filled with phase-change-materials are to be mounted on steam accumulators in order to reduce the pressure and temperature fluctuations during steam release and increase the amount of heat that can be stored.

The material parameters required for the simulations were taken from the literature when possible. For material parameters for which no numerical values were available, the values were estimated.

Structural finite elements from standard software were used for the simulation. However, these are not capable of describing the behavior of fluids with sufficient accuracy. Only the strength values in the liquid state can be reduced until a gel-like behavior is obtained.

In this paper, four material laws are presented which are able to partially describe the behavior of the phase-change-material. Due to the fact that only a few material values are known for phase-change-materials, an additional requirement for the material laws was that they need as few parameters as possible. Therefore, one of the material laws was excluded. No material law was found that was capable of describing the complete behavior of phase-change-materials. The material parameters were then determined for the selected material laws and simulations were carried out on simple containers, followed by a discussion of the results.

Inhalt

Kurzfassung	II
Abstract	111
Verwendete Abkürzungen	VII
Verwendete Symbole	VII
1. Einleitung	1
1.1. Hintergrund der Arbeit	1
1.2. Zielsetzung der Arbeit	1
2. Werkstoffmodelle	2
2.1. Allgemeines	2
2.2. Bilinear Isotropic Hardening [3], [9]	3
2.2.1. Benötigte Werkstoffparameter	4
2.3. Gurson-Tvergaard-Needleman Modell – GTN [3], [7], [10], [14], [19]	4
2.3.1. Wachstum der Hohlräume	5
2.3.2. Entstehung neuer Hohlräume	6
2.3.3. Anwendung des Gurson-Tvergaard-Needleman Modells	6
2.3.4. Benötigte Werkstoffparameter	7
2.4. Modified Cam Clay – MCC [1], [2], [8], [11], [12], [23], [25]	7
2.5. Menetrey-William [1], [8]	7
2.5.1. Benötigte Parameter	10
2.6. Einfache Simulationen mit den Werkstoffgesetzen	11
2.6.1. Belastung durch Eigengewicht	11
2.6.2. Einachsiger Zug	12
2.6.3. Hydrostatischer Druck	13
2.6.4. Abscherung	
2.6.5. Verhalten eines allseitig eingespannten Würfels unter Temperaturbelastung	15
2.6.6. Verhalten eines allseitig eingespannten Würfels unter Zug- und	
Druckbelastung	21
3. Verwendete Software	23
4. Werkstoffkennwerte	24
4.1. Phase-Change-Material [5], [15]	24
4.1.1. Dichte [5]	24
4.1.2. Differenzkoeffizient der Wärmeausdehnung	25
4.1.3. Thermische Leitfähigkeit [5]	25

4.1.4. Enthalpie	26
4.1.5. Elastizitätsmodul	27
4.1.6. Querkontraktionszahl [15]	27
4.1.7. Festigkeitskennwerte	28
4.1.7.1. Bilinear Isotropic Hardening	28
4.1.7.2. Gurson-Tvergaard-Needleman	28
4.1.7.3. Menetrey William	30
4.2. Behälter [13], [26]	30
4.2.1. Differenzkoeffizient der Wärmeausdehnung	30
4.2.2. Dichte	31
4.2.3. Thermische Leitfähigkeit	31
4.2.4. Enthalpie	32
4.2.5. E-Modul	33
4.2.6. Querkontraktionszahl	33
4.2.7. Festigkeitskennwerte	34
5. Durchgeführte Analysen	35
5.1. Analysierte Modelle	35
5.1.1. Einfacher, offener Behälter	35
5.1.2. Behälter mit veränderlichem Querschnitt	35
5.1.3. Ringförmiger Behälter	36
5.1.4. Kontakt zwischen PCM und Behälter	36
5.2. Thermische Analyse	37
5.3. Mechanische Analyse	54
5.3.1. Bilinear Isotropic Hardening	55
5.3.2. Gurson-Tvergaard-Needleman	76
5.3.3. Menetrey William	98
5.4. Zusammenfassung der Ergebnisse und Schlussfolgerung	127
5.4.1. Rechenzeiten der Analyse	127
5.4.2. Effekte während des Erstarrungs- und Schmelzvorgangs	128
5.4.3. Vergleich der Werkstoffgesetze	129
6. Literaturverzeichnis	IX
7. Anhang	XI
7.1. Werkstoffkennwerte	XI
7.1.1. Behälter	XI
7.1.2. PCM	XII

Seite V

7.2. Randbedingungen für die Analysen	XIV
7.2.1. Thermische Analyse	XIV
7.2.2. Mechanische Analyse	XV
7.3. Ergebnisse der Analysen	XVIII
7.3.1. Thermische Analyse	XVIII
7.3.2. Bilinear Isotropic Hardening	XX
7.3.3. Gurson-Tvergaard-Needleman	XXIX
7.3.4. Menetrey William	XXXV

Verwendete Abkürzungen

Abkürzung	Erläuterung
GTN	Gurson-Tvergaard-Needleman
MCC	Modified-Cam-Clay
MW	Menetrey-William
PCM	Phase-Change-Material

Verwendete Symbole

Formelzeichen	Erklärung	Einheit
$\beta_{20,T}, \beta_{230,T}$	Differenzkoeffizient der Wärmeausdehnung	1/K
E	Materialparameter	-
έ ^{pl}	Änderungsrate des plastischen Dehnungstensors	-
$\overline{\epsilon}^{pl}$	Effektive plastische Dehnung	-
$\dot{\overline{\epsilon}}^{pl}$	Änderungsrate der effektiven plastischen Dehnung	-
ε _N	Plastische Dehnung, bei der Lunker entstehen	-
θ	Lodewinkel	0
λ_T	Thermische Leitfähigkeit	W/(m*K)
ν	Poissonzahl	-
ξ	Axiale Spannungskoordinate	MPa
$ρ_T, ρ_{20}, ρ$	Dichte	kg/m³
ρ _s	Radiale Spannungskoordinate	MPa
ρ _{solid}	Dichte im festen Zustand	kg/m³
ρ_{liquid}	Dichte im flüssigen Zustand	kg/m³
σ	Spannungstensor	MPa
σ_0	Fließgrenze aus dem einachsigen Zugversuch	MPa
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	Hauptnormalspannungen	MPa
σ_e	Vergleichsspannung von-Mises	MPa
σ_m	Mittlere Spannung	MPa
σ _y	Fließgrenze	MPa
ψ	Dilitanzwinkel	0
B_{g}	Konstante	MPa
C_0, C_1, C_2, C_3, C_4	Polynomische Koeffizienten	-
C _{2MW}	Konstante der Fließbedingung	1/MPa
C _{3MW}	Konstante der Fließbedingung	1/MPa ²
C _p	Spezifische Wärmekapazität	kJ/(kg*K)
C_g	Konstante	MPa
Ē	Elastizitätsmodul	MPa
е	Materialparameter	-
E_T	Tangentenmodul	MPa
f	Lunkeranteil	-
<i>İ</i>	Änderungsrate des Lunkeranteils	-
f^*	Modifizierter Lunkeranteil	-
f_0	Lunkeranteil im Ausgangszustand	-
f_c	Kritischer Lunkeranteil	-
f_f	Lunkeranteil bei Versagen durch makroskopischen Bruch	-

Behälter für Phasenwechselmaterial

	-	
\dot{f}_{growth}	Wachstumsrate von Lunkern	-
f_N	Spezifisches Volumen der entstehenden Lunker	-
$\dot{f}_{nucleation}$	Entstehungsrate von Lunkern	-
h _{schmelz}	Schmelzenthalpie	kJ/(kg*K)
Ι	Einheitstensor	-
I_1	Invariante des Spannungstensors	MPa
J_2	Invariante des Spannungsdeviators	MPa ²
J_3	Invariante des Spannungsdeviators	MPa ³
p	Hydrostatische Spannung	MPa
q	Vergleichsspannung von-Mises	MPa
q_1, q_2, q_3	Tvergaard-Needleman-Konstanten	-
Q_{MW}	Fließpotential Menetrey William	MPa ²
r	Konstante	-
R_b, \overline{R}_b	Zweiachsige Druckspannung bei Fließbeginn	MPa
R_c, \bar{R}_c	Einachsige Druckspannung bei Fließbeginn	MPa
R_t, \bar{R}_t	Einachsige Zugspannung bei Fließbeginn	MPa
S _N	Standardabweichung der Dehnung bei	-
	Lunkerentstehung	
Т	Temperatur	°C

1. Einleitung

Das folgende Kapitel bietet einen Überblick über die Hintergründe und Zielsetzung der Arbeit.

1.1. Hintergrund der Arbeit

Für eine Vielzahl von verfahrenstechnischen Prozessen wird Dampf benötigt. Da die Produktion und der Bedarf von Dampf Schwankungen unterliegen, muss der Dampf geeignete Weise zwischengespeichert werden. Dies geschieht mittels auf Dampfspeichern. Die Dampfspeicher sind dabei mit einem Gemisch aus Wasser am Siedepunkt und Sattdampf gefüllt. Sie zählen zu den sensiblen Wärmespeichern, da sich beim Lade- und Entladevorgang die Temperatur und der Druck im Dampfspeicher Temperaturänderung ändern. Diese Druckund ist die Folge der Entspannungsverdampfung. Wird Dampf aus dem Dampfspeicher entnommen, sinkt der Druck. Dadurch sinkt auch die Siedetemperatur des Wassers, wodurch ein Teil des Wassers verdampft. Die für die Verdampfung benötigte Energie stammt aus dem Wasser, wodurch die Temperatur im Dampfspeicher sinkt.

Um Temperaturschwankungen während des Ladedie Druck- und und Entladevorgangs zu verringern und die speicherbare Wärmemenge zu erhöhen, PCM-Modulen (Phase-Change-Material-Modulen) können Dampfspeicher mit ausgerüstet werden. Das PCM durchläuft am Schmelzpunkt einen Phasenwechsel von flüssig zu fest beim Entladevorgang, bzw. von fest zu flüssig beim Ladevorgang. Dabei wird eine große Wärmemenge – die Schmelzenthalpie – bei konstanter Temperatur abgegeben. Als PCM werden unter anderem auch Salze verwendet. Die Vorteile von Salz als PCM sind, dass es am Schmelzpunkt eine große Wärmemenge abgibt und abhängig vom verwendeten Salz die Kosten gering sind. Von Nachteil ist, dass Salze korrosiv sind und eine große thermische Ausdehnung aufweisen. Aufgrund der großen thermischen Ausdehnung kommt es während des Erstarrens im Salz zu großen Volumenänderungen und zur Bildung von Vakuumeinschlüssen (Lunkern) im Salz. Während des anschließenden Ladevorgangs kommt es beim Erhitzen und Schmelzen des PCM zu thermischer Ausdehnung. Aufgrund der niedrigen thermischen Leitfähigkeit des PCM schmilzt dieses lokal und erzeugt dabei Belastungen auf den Behälter. Um die auf den Behälter entstehenden Belastungen abschätzen zu können, müssen das Erstarren und Schmelzen des PCM simuliert werden.

1.2. Zielsetzung der Arbeit

Ziel der Arbeit ist es, das Erstarren und Schmelzen von PCM in einfachen, offenen Behältern mithilfe strukturmechanischer Finiter Elemente aus Standardsoftware durch Auswahl von geeigneten Werkstoffgesetzen zu simulieren. Die während des Erstarrens auftretenden Effekte wie Lunkerbildung im PCM und Spaltbildung zwischen PCM und Behälter sollen dabei berücksichtigt werden und das Verhalten des festen PCM soll durch die Wahl geeigneter Werkstoffgesetze möglichst vollständig beschrieben werden, sowie das Verhalten des flüssigen PCM angenähert werden. Für das PCM wird eine eutektische Mischung aus KNO₃ und NaNO₃ verwendet, für den Behälter ein austenitischer Edelstahl. Die Analyse wird für einen Temperaturbereich von 200°C bis 230°C durchgeführt.

2. Werkstoffmodelle

Das folgende Kapitel bietet einen Überblick und Erläuterungen, sowie theoretische Grundlagen der für die Analyse möglichen Werkstoffmodelle. Da die spätere Analyse mit "Ansys Workbench" durchgeführt wird, werden nur Werkstoffmodelle betrachtet, welche im Programm implementiert sind, da das Programmieren eigener Werkstoffmodelle den Umfang dieser Arbeit übersteigen würde.

Am Ende des Kapitels wurden mit den Werkstoffmodellen einige Versuche im flüssigen und festen Zustand durchgeführt, um deren Verhalten besser abschätzen zu können.

2.1. Allgemeines

Da die für die Analyse verwendeten Werkstoffmodelle das Verhalten während des Schmelzens und Erstarrens möglichst genau beschreiben sollen, wird zuerst das Verhalten des PCM während dieser Vorgänge beschrieben.

Die Werkstoffeigenschaften des PCM im festen und flüssigen Zustand weisen innerhalb des betrachteten Temperaturintervalls annähernd lineares Verhalten auf. Schmelzpunkt es einem sprungartigen Am kommt zu Übergang der Werkstoffeigenschaften von fest zu flüssig. Ein teigartiges Verhalten während des Erstarrens wurde in Versuchen nicht beobachtet. Aufgrund der starken Temperaturabhängigkeit der Dichte und der sprungartigen Änderung der Dichte am Schmelzpunkt, kommt es zu großen Volumenänderungen im PCM. Solange das PCM lokal noch flüssig ist, können diese Volumenänderungen zur Bildung von Lunkern und deren Wachstum bzw. Vereinigung führen.

Im bereits erstarrten PCM kommt es zu keiner Lunkerbildung oder -vergrößerung, da dieses spröde ist. Die auftretenden Risse im PCM und gegebenenfalls Versagen durch Bruch werden nicht berücksichtigt. Aufgrund der Sprödheit des PCM ist außerdem die Zugfestigkeit geringer als die Druckfestigkeit und es gibt keinen ausgeprägten Fließbereich, sondern es kommt rasch zum Bruch des PCM.

Die Werkstoffmodelle sollten daher in der Lage sein, die Bildung von Lunkern zu simulieren und die großen Unterschiede in Zug- und Druckfestigkeit zu erfassen, sowie im Bereich oberhalb des Schmelzpunktes das Verhalten einer Flüssigkeit gut annähern können.



Abbildung 2.1: Schnitt durch erstarrtes PCM, [15]

In Abb.2.1 ist ein Schnitt durch einen Zylinder aus erstarrtem PCM dargestellt. Der Durchmesser beträgt dabei ca. 5,1cm. Diese Probe [15] des PCM wurde in einem Rohr aus PTFE an der Umgebung abgekühlt. Zur Lunkerbildung ist es vor allem in der Mitte des PCM gekommen, da dieser Bereich zuletzt erstarrt. Außerdem hat sich im oberen Bereich des PCM ein Trichter gebildet, da aufgrund der Schwerkraft und der Verringerung des Volumens flüssiges PCM in Richtung des Bodens fließt.

2.2. Bilinear Isotropic Hardening [3], [9]

Dieses Werkstoffmodell basiert auf der von-Mises-Fließfläche. Die von-Mises-Fließbedingung ist isotrop und unabhängig von der hydrostatischen Spannung. Fließen tritt auf, wenn folgende Bedingung erfüllt ist:

$$f(\sigma, \sigma_y) = \frac{\sigma_e}{\sigma_y} - 1 = 0$$
(2.1)

 σ_y ist dabei die Fließgrenze und σ_e die von-Mises-Vergleichsspannung. Mit den Hauptnormalspannungen σ_1, σ_2 und σ_3 bzw. der zweiten Invariante des Spannungsdeviators J_2 ergibt sich die von-Mises-Vergleichsspannung zu:

$$\sigma_e = q = \sqrt{\frac{1}{2} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]} = \sqrt{3 * J_2}$$
(2.2)

Das Werkstoffmodell besitzt eine assoziierte Fließregel und das Volumen bleibt während des Fließens konstant. Während des Fließens kommt es zu einer isotropen Vergrößerung der Fließfläche.

Mit diesem Modell wird eine bilineare Spannungs-Dehnungskurve beschrieben (Abb.2.2). Dieses Werkstoffmodell benötigt neben den Parametern für elastisches Verhalten *E* und v, mit dem Tangentenmodul E_T nur einen zusätzlichen Parameter zur Fließgrenze σ_0 . Dabei muss die Bedingung $0 \le E_T < E$ erfüllt sein.

Der Vorteil dieses Modells ist, dass es sehr einfach ist, da es neben den Parametern für elastisches Verhalten, nur zwei Parameter benötigt, jedoch können weder die großen Unterschiede zwischen Zug- und Druckfestigkeit dargestellt werden, noch ist es möglich die Bildung von Lunkern im Material zu simulieren.



Abbildung 2.2: Spannungs-Dehnungskurve für Bilinear Isotropic Hardening

2.2.1. Benötigte Werkstoffparameter

Formelzeichen	Benennung	Einheit
σ_0	Fließgrenze	MPa
E_T	Tangentenmodul	MPa

Tabelle 2-1: Werkstoffparameter für Bilinear Isotropic Hardening

Für die Parameter müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:

 $0 \leq E_T < E$

2.3. Gurson-Tvergaard-Needleman Modell – GTN [3], [7], [10], [14], [19] Das GTN-Modell wird zur Modellierung von Plastizität und Schäden in duktilen Metallen verwendet und ist ein Modell basierend auf der Kontinuumsmechanik. Die Hohlräume werden als sphärisch angenommen. Das Kriterium basiert auf der von-Mises-Vergleichsspannung σ_e , besitzt eine assoziierte Fließregel und kann zusätzlich mit Verfestigungs- und Erweichungskriterien kombiniert werden. Mit diesem Werkstoffmodell können die Bildung, die Verbindung und das Wachstum von Lunkern im Material modelliert werden. Diese mikroskopischen Vorgänge werden basierend auf einem Lunkervolumenanteil f im Material makroskopisch beschrieben und es kommt zu einer Vergrößerung bzw. Verkleinerung der Fließfläche in Abhängigkeit vom Lunkeranteil. In Abb. 2.3 ist die Fließfläche in der p-q-Ebene dargestellt.



Abbildung 2.3: Fließfläche GTN in der p-q-Ebene

Die Fließbedingung ist dabei:

$$f(\sigma, \sigma_y) = \left(\frac{\sigma_e}{\sigma_y}\right)^2 + 2 * f^* * q_1 * \cosh\left(\frac{3}{2} * \frac{q_2 * p}{\sigma_y}\right) - (1 + q_3 * f^{*2}) = 0$$

$$p = \frac{\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3}{3}$$
(2.3)
(2.4)

 σ_y ist dabei die Fließgrenze, σ_e die Vergleichsspannung, q_1, q_2 und q_3 sind Parameter zur Modifizierung der Fließfläche, p der hydrostatische Druck und f^* der modifizierte Lunkeranteil im Material mit:

$$f^{*} = \begin{cases} f & \text{if } f \leq f_{c} \\ f_{c} + \frac{1}{q_{1}} - f_{c} \\ f_{c} - f_{c} + \frac{1}{f_{f}} - f_{c} \end{cases} (2.5)$$

 f_c ist dabei die kritische Porosität und ist jene Porosität, bei der es zur Verbindung der Hohlräume kommt. Sie berücksichtigt festigkeitsverminderndes Verhalten. Die Anzahl der Lunker im betrachteten Volumenelement bleibt allerdings für das Wachstumsmodell konstant und ist von f_c unabhängig. Bei Erreichen von f_f kommt es zum makroskopischen Bruch im Material.

Die Änderung des Lunkervolumenanteils \dot{f} im Material ergibt sich als Summe der neu entstehenden Lunker $\dot{f}_{nucleation}$ und durch Wachstum bereits vorhandener Lunker \dot{f}_{growth} zu:

$$\dot{f} = \dot{f}_{growth} + \dot{f}_{nucleation} \tag{2.6}$$

2.3.1. Wachstum der Hohlräume

Bereits im Material existierende Hohlräume wachsen, wenn sich das Material in einem hydrostatischen Spannungszustand befindet. Das feste Material wird als inkompressibel angenommen, wodurch die gesamte Volumenzunahme durch Vergrößerung der Hohlräume entsteht. Schubverzerrungen haben dabei keinen Einfluss auf das Wachstum der Hohlräume. Die Wachstumsrate ist proportional zur Änderungsrate der plastischen Dehnung $\dot{\varepsilon}^{pl}$ und dem Lunkeranteil *f* und ergibt sich mit dem Einheitstensor *I* zu:

$$\dot{f}_{growth} = (1 - f) * \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\boldsymbol{pl}} : \boldsymbol{I}$$
(2.7)

Der Matrixoperator : entspricht einer doppelten Überschiebung und wird für zwei Matrizen A und B folgendermaßen berechnet:

$$\boldsymbol{A}:\boldsymbol{B} = \sum_{i,j} (A_{ij} * B_{ij})$$
(2.7)

2.3.2. Entstehung neuer Hohlräume

Die Bildung neuer Lunker kann entweder spannungs- oder dehnungsgesteuert erfolgen. Für dehnungsgesteuerte Lunkerbildung ergibt sich die Bildungsrate neuer Hohlräume $\dot{f}_{nucleation}$ zu:

$$\dot{f}_{nucleation} = \frac{f_N * \dot{\varepsilon}^{pl}}{S_N * \sqrt{2 * \pi}} * exp^{-\frac{1}{2} * \left(\frac{\overline{\varepsilon}^{pl} - \varepsilon_N}{S_N}\right)^2}$$
(2.8)

Die Änderungsrate der effektiven plastischen Dehnung $\dot{\overline{\epsilon}}^{pl}$ ist gegeben durch:

$$\dot{\varepsilon}^{pl} = \frac{\boldsymbol{\sigma}: \dot{\varepsilon}^{pl}}{(1-f) * \sigma_{y}}$$
(2.9)

 f_N ist dabei das spezifische Volumen der entstehenden Lunker und $\overline{\epsilon}^{pl}$ die effektive plastische Dehnung. Die Hohlraumentstehung liegt einer Gauß'schen Normalverteilung zugrunde, wobei die meisten Lunker bei der Dehnung ϵ_N entstehen und s_N die Standardabweichung ist.

2.3.3. Anwendung des Gurson-Tvergaard-Needleman Modells

Die Anwendung gestaltet sich schwierig. Die Lösung wird von der Elementierung beeinflusst. Insbesondere durch die Vereinigung der Hohlräume entsteht eine Dehnungserweichung, welche anfällig für Lokalisierungseffekte, Instabilitäten und Gabelungen ist. Daher sind die Lösungen auch von der Vernetzung abhängig.

Die direkte experimentelle Bestimmung der Parameter durch Versuche ist sehr zeitund kostenintensiv. Es wird daher vorgeschlagen, die Parameter über numerische Versuche zu gewinnen und solange anzupassen, bis die Ergebnisse aus Simulation und Experiment übereinstimmen. Dazu können diverse Optimierungsstrategien verwendet werden.

Um die Parameter bestimmen zu können, liegen jedoch für das PCM keine ausreichenden Versuchsdaten vor.

In [19] ist eine Sensitivitätsanalyse zur Änderung einiger ausgewählter Parameter und deren Einfluss auf die Änderung des Simulationsergebnisses vorhanden. Daraus geht hervor, dass kleine Änderungen der Parameter einen großen Einfluss auf die Lösung haben.

Laut [7] wirken sich folgende Punkte positiv auf die Konvergenz des Modells aus:

• Verringerung der maximalen Zeitschrittweite

- Einschalten eines Line-Search Algorithmus •
- Erhöhung der erlaubten Iterationen pro Inkrement •
- Vergrößerung der Verschiebungstoleranz, wobei dadurch die Gefahr von Fehlern, die sich aufsummieren, steigt
- Remeshing geschädigter Bereiche
- Steuerung und Einfluss der Reststeifigkeiten durch Einsatz von Feder- und Dämpferelementen zwischen Ligamentknoten

Mit diesem Modell kann die Bildung und das Wachstum von Lunkern im Material beschrieben werden, die Unterschiede in Druck- und Zugfestigkeit sind jedoch nicht erfassbar.

2.3.4. Benötigte Werkstoffparameter

Formelzeichen	Benennung	Einheit
σ_y	Fließgrenze	MPa
f_0	Lunkeranteil im Ausgangszustand	-
q_1	Erste Tvergaard-Needleman- Konstante	-
q_2	Zweite Tvergaard-Needleman- Konstante	-
q_3	Dritte Tvergaard-Needleman- Konstante	-
f_N	Spezifisches Volumen der entstehenden Lunker	-
ϵ_N	Dehnung für Hohlraumentstehung	-
S _N	Standardabweichung der Dehnung	-
f_c	Kritische Porosität	-
f_f	Porosität bei makroskopischem Bruch / Versagen	-
,	Tabelle 2.2: Workstoffparameter für GTN	•

Tabelle 2-2: Werkstoffparameter für GTN

Für die Parameter müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:

 $f_c < f_f$ $q_1 > 0$ $q_2 > 0$

2.4. Modified Cam Clay – MCC [1], [2], [8], [11], [12], [23], [25]

Dieses Werkstoffmodell stammt aus der Geomechanik und findet Anwendung bei der Simulation von geschütteten Geomaterialien wie z.B. Sand. Mit diesem Werkstoffgesetz können die Vergrößerung und Verkleinerung der Lunker und deren Einfluss auf die Festigkeitskennwerte erfasst werden, sowie die Unterschiede in Zugund Druckfestigkeit dargestellt werden.

Aufgrund der Vielzahl an Werkstoffkennwerten wurde dieses Werkstoffmodell jedoch nicht weiterverfolgt, da es nicht möglich war diese festzulegen.

2.5. Menetrey-William [1], [8]

Dieses Werkstoffmodell stammt aus der Geomechanik und eignet sich besonders für gebundene Geomaterialien, wie z.B. Beton, welche große Unterschiede in der Zugund Druckfestigkeit aufweisen.

Es basiert auf der Fließfläche von William-Warnke. Diese ist an jedem Punkt konvex und glatt und ist dreifach symmetrisch. Dies wird durch Verwendung von elliptischen

Teilen erzielt. Die Fließfläche ist ähnlich der Mohr-Coloumb Fließfläche, jedoch ohne die scharfen Kanten, welche zu Konvergenzproblemen führen können.

Das Materialmodell kann zusätzlich um Verfestigungs- und Erweichungsverhalten ergänzt werden. Da zur Festlegung dieses Verhaltens allerdings keine Werkstoffkennwerte gegeben sind, werden weder Verfestigungs- noch Erweichungsverhalten während des Fließens betrachtet.

Das Basismodell benötigt, zusätzlich zu E-Modul und Querkontraktionszahl, nur 4 Werkstoffparameter:

- Einachsige Zugspannung bei Fließbeginn R_t
- Einachsige Druckspannung bei Fließbeginn R_c
- Zweiachsige Druckspannung bei Fließbeginn R_b
- Dilitanzwinkel ψ

Wobei gilt: $R_b > R_c > R_t$

Das Modell besitzt eine nicht-assoziierte Fließregel und resultiert in einer unsymmetrischen konsistenten Materialtangente. Die Fließfläche ist in Abb.2.4. in der $\xi - \rho_s$ -Ebene dargestellt und gegeben mit:

$$f_{MW} = \frac{c_{2MW}}{c_{3MW}} * \left(\sqrt{2} * \xi + r * \rho_S\right) + \rho_S^2 - \frac{1}{c_{3MW}} = 0$$
(2.10)



Abbildung 2.4: Fließfläche Menetrey-William

Dabei sind ξ und ρ_S Spannungskoordinaten, r ist eine Funktion der Spannungskoordinaten und Materialparameter und sind C_{2MW} und C_{3MW} Materialparameter.

Die Fließfläche wird in Haigh-Westergaard-Spannungskoordinaten (Abb.2.5) beschrieben. Die Haigh-Westergaard Spannungskoordinaten sind:

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{3}} * I_1$$
 (2.11)

$$\rho_S = \sqrt{2 * J_2} \tag{2.12}$$

$$\cos(3*\theta) = \frac{3*\sqrt{3}}{2} * \frac{J_3}{\sqrt{J_2^2}}$$
(2.13)

Für den Winkel θ gilt dabei: $0 \le \theta \le 60^{\circ}$

 I_1 ist dabei eine Invariante des Spannungstensors und J_2 und J_3 sind Invarianten des Spannungsdeviators, wobei σ_m die mittlere Spannung ist:

$$l_1 = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 \tag{2.14}$$

$$J_2 = \frac{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2}{6}$$
(2.15)

$$J_3 = (\sigma_1 - \sigma_m) * (\sigma_2 - \sigma_m) * (\sigma_3 - \sigma_m)$$
(2.16)



Abbildung 2.5: Haigh-Westergaard Spannungskoordinaten, [24]

 c_{2MW} und c_{3MW} sind Funktionen der Materialparameter und der Verfestigungs- und Erweichungsfunktionen. Da Verfestigungs- und Erweichungsverhalten nicht betrachtet werden, gilt $\bar{R}_t = R_t$, $\bar{R}_c = R_c$ und $\bar{R}_b = R_b$.

$$c_{2MW} = \frac{1}{\sqrt{6}} * \left(\frac{1}{\bar{R}_c} - \frac{1}{\bar{R}_b} + \frac{\bar{R}_b - \bar{R}_t}{\bar{R}_c^2} \right)$$
(2.17)

$$c_{3MW} = \frac{3}{2} * \frac{1}{\bar{R}_c^2} \tag{2.18}$$

$$r = (2.19)$$

$$4 * (1 - e^2) * \cos^2(\theta) + (2 * e - 1)^2$$

$$\frac{1}{2 * (1 - e^2) * \cos(\theta) + (2 * e - 1) * \sqrt{4 * (1 - e^2) * \cos^2(\theta) + 5 * e^2 - 4 * e^2}}$$

Seite 9

$$e = \frac{1+\epsilon}{2} \tag{2.20}$$

$$\epsilon = \frac{\bar{R}_t}{\bar{R}_b} * \frac{\bar{R}_b^2 - \bar{R}_c^2}{\bar{R}_c^2 - \bar{R}_t^2}$$
(2.21)

Das Fließpotential Q_{MW} ist:

$$Q_{MW} = \rho_S^2 + B_g * \rho_S + C_g * \xi$$
 (2.22)

Mit:

$$B_g = \frac{2 * \bar{R}_c * \tan(\psi) - \sqrt{2} * \bar{R}_t}{\sqrt{3} * (1 - \sqrt{2} * \tan(\psi))}$$
(2.23)

$$C_g = \frac{B_g}{\sqrt{2}} + \frac{2 * \bar{R}_t}{\sqrt{2}} \tag{2.24}$$

$$\frac{R_t}{\sqrt{2} * R_c} < \tan(\psi) \le \frac{1}{\sqrt{2}}$$
(2.25)

Der Dilitanzwinkel ψ kann dabei auch signifikant kleiner als der Winkel der inneren Reibung sein. Er stellt einen Zusammenhang zwischen einer plastischen Verformung durch Abscherung und der dabei entstehenden Volumenvergrößerung dar (Abb.2.10).



Abbildung 2.6: Dilitanzwinkel bei Schubverformung

Mit diesem Materialgesetz können die Unterschiede der Zug- und Druckfestigkeit erfasst werden, sowie die Lunkerbildung durch Vergrößerung des Volumens simuliert werden.

2.5.1. Benötigte Parameter

Formelzeichen	Benennung	Einheit
R _c	Einachsige Druckspannung bei Fließbeginn	MPa
R _t	Einachsige Zugspannung bei Fließbeginn	MPa
R _b	Zweiachsige Druckspannung bei Fließbeginn	MPa
$\overline{\psi}$	Dilitanzwinkel	0
	To be the O. O. Marting to fine one we star Marine track Maline as	

Tabelle 2-3: Werkstoffparameter Menetrey-William

Für die Parameter müssen folgende Bedingungen erfüllt sein:

$$R_c > R_t$$
$$R_b > R_c$$

$$\frac{R_t}{\sqrt{2} * R_c} < \tan(\psi) \le \frac{1}{\sqrt{2}}$$

2.6. Einfache Simulationen mit den Werkstoffgesetzen

Mithilfe strukturmechanischer Finiter Elemente kann kein flüssiges Verhalten simuliert werden. Es können lediglich die Werkstoffkennwerte so weit abgesenkt werden, damit ein gel- bzw. teigartiges Verhalten möglich ist. Aus diesem Grund wurden an einem einfachen Körper mit den unterschiedlichen Werkstoffmodellen und -kennwerten (Kap.4.) im flüssigen und festen Zustand einige Analysen durchgeführt, um die Reaktionskräfte und das Verhalten zu ermitteln. Folgende Analysen wurden dabei durchgeführt:

- Belastung durch Eigengewicht
- Einachsiger Zug durch vorgegebene Verschiebung
- Hydrostatischer Druck
- Abscherung durch vorgegebene Verschiebung
- Verhalten eines allseitig eingespannten Würfels unter Temperaturbelastung
- Verhalten eines allseitig eingespannten Würfels unter Zug- und Druckbelastung

Als Modell für die Analysen 2.6.1. bis 2.6.4. dient dabei ein Würfel mit 8mm Kantenlänge. Die Vernetzung erfolgt dabei mit quadratischen Ansatzfunktionen und einer Elementgröße von 1mm. Die Analysen 2.6.1., 2.6.3. und 2.6.4. wurden an einem 2-dimensionalen Modell mit einem ebenen Verzerrungszustand durchgeführt, Analyse 2.6.2. an einem 2D-Modell mit ebenem Spannungszustand.

Für die Analysen 2.6.5 und 2.6.6. wurde ein 3-dimensionales Modell verwendet, mit einer Kantenlänge von 2mm, einer Elementgröße von 0,25mm und quadratischen Ansatzfunktionen.

Die Analysen wurden für den flüssigen Bereich mit einer Temperatur von 230°C durchgeführt, für den festen Bereich mit 215°C.

2.6.1. Belastung durch Eigengewicht

Unter Eigengewicht sollte bei einer Flüssigkeit ein "Zerlaufen" auftreten, da zwischen den Molekülen der Flüssigkeit nur sehr geringe Anziehungskräfte wirken. Dies kann durch Absenken der Festigkeitswerte erzielt werden, jedoch treten dann Instabilitäten bei der Analyse auf. Unter Belastung mit Eigengewicht kommt es mit den gewählten Werkstoffkennwerten im flüssigen Zustand nur zu sehr geringen Verformungen (8.0778*10⁻⁵mm). Die auftretenden Normalspannungen in vertikaler Richtung bleiben dabei im elastischen Bereich (siehe Abb.2.8). In der Abbildung sind dabei der undeformierte Rahmen und der deformierte Körper mit einer Vergrößerung der Verformung auf das 1000-fache dargestellt.



Abbildung 2.7: Randbedingung der Simulation, 2D-Modell ebener Verzerrungszustand



Abbildung 2.8: Normalspannung in vertikaler Richtung [MPa] unter Eigengewicht – flüssiger Zustand T=230°C

Im festen Zustand sollten die Verformungen unter Eigengewicht nur sehr gering sein. Diese sind mit 1.6995*10⁻⁷mm vernachlässigbar. In Abb. 2.9. sind die dabei auftretenden Normalspannungen in vertikaler Richtung dargestellt. Die Abbildung zeigt dabei den undeformierten Rahmen und den deformierten Körper mit einer Vergrößerung der Verformung auf das 1000-fache.



Abbildung 2.9: Normalspannung in vertikaler Richtung [MPa] unter Eigengewicht - fester Zustand T=215°C

2.6.2. Einachsiger Zug

Flüssigkeiten können keine Zugspannungen aufnehmen. Die Reaktionsspannungen bei vorgegebener Verschiebung sollten daher bei Zug möglichst gering sein. Dazu wurde auf die Oberkante des Blocks eine Verschiebung von 1mm aufgebracht und die Normalspannungen in vertikaler Richtung ausgewertet. In Abb. 2.11 sind die Normalspannungen in vertikaler Richtung [MPa] im flüssigen Zustand dargestellt.

Die auftretenden Spannungen sind gering. Da es bei Bilinear Isotropic Hardening und GTN zu Verfestigung kommt und bei GTN die Zugfestigkeit am größten ist, sind in diesen Modellen die Spannungen größer als beim Menetrey-William Werkstoffmodell.



Abbildung 2.10: Randbedingung der Simulation, 2D-Modell ebener Spannungszustand



Abbildung 2.11: Normalspannung [MPa] – Dehnung, einachsiger Zug – flüssiger Zustand T=230°C

Im festen Zustand sind die Reaktionsspannungen im Vergleich zum flüssigen Bereich deutlich größer (Abb.2.12).



Abbildung 2.12: Normalspannung [MPa] – Dehnung, einachsiger Zug – fester Zustand T=215°C

2.6.3. Hydrostatischer Druck

Da eine ideale Flüssigkeit inkompressibel ist, sollte es unter hydrostatischem Druck zu keiner Verformung (Kompression) kommen. Daher ist die Anforderung, dass bei diesem Versuch die Volumenänderung möglichst klein ist. Dazu wurde auf den Würfel

ein Druck von 1MPa aufgebracht. Aufgrund der Anfangsporosität beim GTN-Modell weist dieses Material die größten Verformungen auf, da es deswegen kompressibel ist (Abb. 2.14).



Abbildung 2.13: Randbedingung der Simulation, 2D-Modell ebener Verzerrungszustand



Abbildung 2.14: Volumen – Druck – flüssiger Zustand T=230°C

Im festen Zustand sind die Verformungen aufgrund des höheren E-Moduls und der Spannungen, die im elastischen Bereich liegen, noch geringer (Abb.2.15).





2.6.4. Abscherung

Flüssigkeit kann keine Schubbelastungen aufnehmen. Bei einer vorgegebenen Verschiebung sollten daher die auftretenden Reaktionsspannungen möglichst gering sein. Dazu wurde eine Verschiebung von 0.4mm aufgebracht. Die dabei auftretenden Reaktionsspannungen sind im flüssigen Zustand vernachlässigbar (Abb. 2.17).



Abbildung 2.16: Randbedingung der Simulation, 2D-Modell ebener Verzerrungszustand



Abbildung 2.17: Schubspannung [MPa] bei Abscherung – flüssiger Zustand T=230°C

Im festen Zustand sind die auftretenden Reaktionsspannungen bedeutend größer (Abb.2.18)



Abbildung 2.18: Schubspannung [MPa] bei Abscherung – fester Zustand T=215°C

2.6.5. Verhalten eines allseitig eingespannten Würfels unter Temperaturbelastung

Aufgrund der fehlenden Lunkerbildung bei Bilinear Isotropic Hardening ist diese Simulation nur für die Werkstoffmodelle von Menetrey-William und Gurson-Tvergaard-Needleman sinnvoll. Die Temperatur wurde ausgehend von einer Temperatur von 230°C gleichmäßig für den gesamten Körper verändert. In den folgenden Abbildungen sind die Randbedingungen dargestellt.



Abbildung 2.19: Mechanische Randbedingung, 3D-Modell, Verschiebung normal zur Vorder- und Rückseite gesperrt







Abbildung 2.21: Thermische Dehnung - Zeitschritt

Zeitschritt



Abbildung 2.22: Verlauf der hydrostatischen Spannung für GTN und Randbedingung 1

Behälter für Phasenwechselmaterial



Abbildung 2.23: Verlauf der hydrostatischen Spannung für GTN und Randbedingung 2



Abbildung 2.24: Verlauf der hydrostatischen Spannung für MW und Randbedingung 1



Abbildung 2.25: Verlauf der hydrostatischen Spannung für MW und Randbedingung 2

In den Abb. 2.22 bis 2.25 ist sichtbar, dass während des Erstarrens Zugspannungen und während des Schmelzens Druckspannungen auftreten. Aufgrund der Randbedingungen war das Volumen während dieser Vorgänge konstant. Da bei MW Fließen unter hydrostatischem Druck nicht auftritt, treten bei diesem Modell sehr hohe Druckspannungen auf, bis der flüssige Bereich erreicht wird. Dann verringern sich die Druckspannungen aufgrund des kleineren E-Moduls. Das Volumen verringert sich beim Schmelzen allerdings nur elastisch. Beim GTN-Modell sind die Spannungen aufgrund der Verkleinerung der Lunker und des Auftretens von Fließen auch beim Schmelzen beschränkt.

2.6.6. Verhalten eines allseitig eingespannten Würfels unter Zug- und Druckbelastung

Aufgrund der fehlenden Lunkerbildung bei Bilinear Isotropic Hardening ist diese Simulation nur für die Werkstoffmodelle von Menetrey-William und Gurson-Tvergaard-Needleman sinnvoll. Der Körper befindet sich dabei im flüssigen Zustand, hat eine Temperatur von 230°C und es wird eine Verschiebung von 0.2mm aufgebracht. In den folgenden Abbildungen sind die Randbedingungen dargestellt.



Abbildung 2.26: Randbedingung für die Analyse, 3D-Modell, Verschiebung normal zur Vorder- und Rückseite gesperrt



Abbildung 2.27: Verlauf der hydrostatischen Spannung für GTN





Abbildung 2.28: Verlauf der hydrostatischen Spannung für MW

Die Zugspannungen bleiben für beide Werkstoffgesetze in einem niedrigen Bereich (Abb. 2.26-2.27). Da bei MW unter hydrostatischem Druck kein Fließen auftritt, entstehen während der Kompression hohe Spannungen, ähnlich wie bei der Analyse 2.6.5., und die Volumenänderung ist elastisch. Die auftretenden Spannungen sind bei GTN aufgrund der Lunkerbildung und des Fließens geringer.

3. Verwendete Software

Im folgenden Kapitel wird die für die Analysen und Auswertungen verwendete Software aufgelistet und beschrieben.

Ansys Academic Research Mechanical:

Für die Finite Elemente Analyse wurde "Ansys Academical® Research Mechanical Release 2020 R2" verwendet. Zum Erzeugen der analysierten Modelle wurde der integrierte "Design Modeller" verwendet. Zur Durchführung der Analysen wurde "Ansys Workbench" verwendet. Darin wurden die Umgebungs- und Werkstoffparameter eingestellt und das Post-Processing durchgeführt.

Microsoft Excel:

Microsoft Excel ist ein Tabellenkalkulationsprogramm und wurde verwendet, um die Werkstoffwerte darzustellen und daraus Diagramme zu erstellen, sowie für die Werkstoffwerte benötigte Berechnungen durchzuführen und um Ergebnisse aus der FE-Analyse aufzubereiten.

Microsoft Word:

Microsoft Word ist ein Textverarbeitungsprogramm und wurde zum Erstellen der Diplomarbeit verwendet.

NanoCAD:

NanoCAD ist eine Software für 2D-Design und Konstruktion und wurde zum Erstellen der Skizzen für die Behälter verwendet.

4. Werkstoffkennwerte

Das folgende Kapitel bietet einen Überblick über die Kennwerte der für das PCM und den Behälter verwendeten Werkstoffe. Die Werkstoffkennwerte mussten teilweise modifiziert werden, da die durchgeführten einseitig gekoppelten Analysen keine Volumenänderung berücksichtigen und sprunghafte Änderungen der Werkstoffwerte wie sie am Schmelzpunkt auftreten mithilfe strukturmechanischer Finiter Elemente nicht erfasst werden können. Für den Schmelzpunkt wurde ein Temperaturintervall von 1°C gewählt. Kleinere Temperaturintervalle würden das reale Verhalten zwar besser annähern, allerdings steigen auch die Konvergenzprobleme.

In Anhang 7.1. sind die Wertetabellen zu den Werkstoffkennwerten enthalten.

4.1. Phase-Change-Material [5], [15]

Das PCM hat einen Schmelzpunkt von 222°C. Da sich ein Schmelzpunkt mithilfe strukturmechanischer Finiter Elemente nicht modellieren lässt, wurde für die thermischen Eigenschaften, die Dichte und den Wärmeausdehnungskoeffizienten ein Schmelzintervall von 221°C bis 222°C verwendet. Da beim PCM während des Schmelzens und Erstarrens kein teigiger Zustand auftritt, wurde angenommen, dass sich die Festigkeitskennwerte sprunghaft ändern, wenn 100% des PCM erstarrt sind. Das Intervall für diese Änderung liegt zwischen 220°C und 221°C.

4.1.1. Dichte [5]

Für die Dichte sind Werte in einem Bereich von 0°C-500°C vorhanden. Sowohl im flüssigen als auch im festen Bereich ändert sich die Dichte linear mit der Temperatur.

Für den flüssigen Bereich (T \ge 222°C) gilt für die Dichte in g/cm³ und die Temperatur T in °C:

$$\rho_{Liquid} = 2.112 - 6.891 * 10^{-4} * T \tag{4.1}$$

Für den festen Bereich (T \leq 222°C) gilt für die Dichte in g/cm³ und die Temperatur T in °C:

$$\rho_{solid} = 2.193 - 6,418 * 10^{-4} * T \tag{4.2}$$

Daraus ergibt sich folgendes Diagramm für die Dichte in Abhängigkeit von der Temperatur bei einem Schmelzintervall von 1°C:



Abbildung 4.1: Dichte - Temperatur PCM

4.1.2. Differenzkoeffizient der Wärmeausdehnung

Der Differenzkoeffizient der Wärmeausdehnung mit einer Bezugstemperatur von 230°C kann aus der Dichte ρ und der Temperatur *T* in °C errechnet werden:

$$\beta_{230,T} = \frac{\sqrt[3]{\frac{\rho_{230}}{\rho_T}} - 1}{T - 230}$$
(4.3)

Daraus ergeben sich folgende Werte für ein Schmelzintervall von 1°C:



Abbildung 4.2: Wärmeausdehnungskoeffizient - Temperatur PCM

Aufgrund der starken Nichtlinearität des Wärmeausdehungskoeffizienten, muss dieser in ausreichend kleinen Temperaturschritten definiert werden, um eine kontinuierliche Veränderung des Volumens zu gewährleisten. Als Eingabe in "Ansys" wurde der Wärmeausdehnungskoeffizient daher mit einer Temperaturschrittweite von 0.5°C definiert.

4.1.3. Thermische Leitfähigkeit [5]

Für die thermische Leitfähigkeit sind Werte in einem Temperaturbereich von 50-100°C und ab 222°C vorhanden. Die thermische Leitfähigkeit wurde aufgrund der vorhandenen Werte sowohl für den flüssigen Bereich mit $0.457 \frac{W}{m*K}$ als auch für den festen Bereich mit $0.38 \frac{W}{m*K}$ als über den betrachteten Temperaturbereich konstant angenommen.

Daraus ergeben sich folgende Werte für die Wärmeleitfähigkeit für ein Schmelzintervall von 1°C:



Abbildung 4.3: Wärmeleitfähigkeit - Temperatur PCM

4.1.4. Enthalpie

Die Enthalpie kann aus der spezifischen Wärmekapazität c_p , der Dichte ρ , der Schmelzenthalpie $h_{schmelz} = 108 \frac{kJ}{kg^{*K}}$ und der Temperatur *T* errechnet werden. Da bei der thermischen Analyse im Zuge der einseitig gekoppelten Analyse Wärmeausdehnungseffekte nicht berücksichtig werden können, wird die Enthalpie über die Dichte im Ausgangszustand bei 230°C berechnet.

Für die spezifische Wärmekapazität sind in [5] folgende Werte für ein Schmelzintervall von 1°C gegeben:



Abbildung 4.4: Wärmekapazität - Temperatur PCM

Daraus ergeben sich folgende Werte für die Enthalpie für ein Schmelzintervall von 1°C:



Abbildung 4.5: Enthalpie - Temperatur PCM

4.1.5. Elastizitätsmodul

Für den E-Modul sind in [15] nur Werte bis ca. 125°C vorhanden. Da beim erstarrenden PCM kein "teigiges" Verhalten auftritt, wird angenommen, dass die Festigkeitswerte ab 125°C bis 220°C konstant bleiben und danach sprunghaft abfallen. Für den flüssigen Bereich wurde der E-Modul mit 10MPa vernachlässigbar klein gegenüber dem E-Modul im festen Bereich gewählt. Wichtig für die Analyse ist, dass der E-Modul im flüssigen Bereich nicht zu gering ist, da ansonsten die elastischen Dehnungen bei Fließbeginn groß wären und dadurch große elastische Verformungen auftreten, die plastischen Verformungen jedoch gering sind.



Für einen Schmelzintervall von 220°C bis 221°C ergibt sich der E-Modul damit zu:

Abbildung 4.6: E-Modul - Temperatur PCM

4.1.6. Querkontraktionszahl [15]

Die Querkontraktionszahl ist nur bis zu einer Temperatur von ca. 125°C bekannt und wurde als über den Temperaturbereich ab 125°C mit 0.49 als konstant angenommen.
4.1.7. Festigkeitskennwerte

4.1.7.1. Bilinear Isotropic Hardening

Für das Werkstoffmodell müssen die Fließgrenze σ_0 und der Tangentenmodul E_T definiert werden. Der Tangentenmodul wurde mit 0.1MPa als über den Temperaturbereich konstant gewählt. Ein Tangentenmodul von 0Mpa würde bedeuten, dass keine Verfestigung während des Fließens auftritt, jedoch kann dies zu Konvergenzproblemen führen. Die Streckgrenze für den flüssigen Zustand sollte möglichst klein sein, um das Verhalten einer Flüssigkeit annähern zu können und wurde mit 0.01MPa gewählt, da im Verhältnis zu den Belastungen sehr kleine Werte zu Konvergenzproblemen führen. Für den festen Bereich sind für die Zugfestigkeit Werte von 3MPa für eine Temperatur bis ca. 125°C gegeben [15]. Da für die Fließgrenze keine Werte gegeben sind und das PCM spröde ist, wurde für die Fließgrenze über die Temperatur für ein Schmelzintervall von 1°C:



Abbildung 4.7: Fließgrenze - Temperatur PCM

4.1.7.2. Gurson-Tvergaard-Needleman

Da das PCM im festen Zustand spröde ist, wurde angenommen, dass Lunkerbildung nur in der flüssigen Phase auftritt. Aufgrund von Konvergenzproblemen bei einer sehr geringen Anfangsporosität f_0 im anfänglich flüssigen Zustand wurde diese mit 0.01 angenommen.

Da für die Auswirkung der Lunker auf die Festigkeit keine Werte vorhanden sind um die Tvergaard-Needleman-Konstanten zu bestimmen, werden diese mit den Standardwerten laut [7] $q_1 = 1.5$, $q_2 = 1$ und $q_3 = 2.25$ als über den Temperaturbereich konstant angenommen.

Für die Dehnung bei Hohlraumentstehung im flüssigen Zustand wurde $\varepsilon_N = 0.01$ gewählt und $f_N = 0.008$. Da im festen Zustand keine Lunkerbildung auftritt, wurde $\varepsilon_N = 10$ gewählt und $f_N = 0.001$.

Für die Dehnung, bei der Lunker entstehen, ergibt sich damit für ein Schmelzintervall von 1°C:



Abbildung 4.8: Dehnung bei Lunkerentstehung - Temperatur PCM

Und für die Größe der entstehenden Lunker für ein Schmelzintervall von 1°C:



Abbildung 4.9: Lunkergröße - Temperatur PCM

Da für die kritische Porosität und Porosität bei Versagen keine Werte vorhanden sind, wurden diese mit hohen Werten als über den Temperaturbereich konstant gewählt und haben somit keinen Einfluss auf die Analyse. Dabei ist $f_c = 0.85$ und $f_f = 0.9$. Die Standardabweichung s_N bei der Lunkerentstehung wurde mit 0.01 angenommen.

Für die Fließgrenze sind folgende Werte gegeben:



4.1.7.3. Menetrey William

Für das Modell werden die einachsige Druck- und Zugspannung bei Fließbeginn, die zweiachsige Druckspannung bei Fließbeginn und der Dilitanzwinkel benötigt. Einachsige Druck- und Zugspannung bei Fließbeginn sind bekannte Größen [15]. Die zweiachsige Druckspannung bei Fließbeginn wurde mit typischen Werten von Beton für das Verhältnis von zweiachsiger Druckspannung bei Fließbeginn zu einachsiger Druckspannung bei Fließbeginn abgeschätzt. Für den Dilitanzwinkel sind die Grenzen mit Glg.2.25 gegeben. Da jedoch keine genauen Werte für diesen ermittelt werden können, wurde er mit 10° als über den Temperaturbereich konstant angenommen.



Abbildung 4.11: Festigkeitskennwerte - Temperatur PCM

4.2. Behälter [13], [26]

Für den Behälter wurde der austenitische Edelstahl X5CrNi18-10 verwendet. Dieser Werkstoff entspricht nach EN 13445-3 der Werkstoffgruppe 8.1. Die Werkstoffkennwerte wurden der EN 10028-7 und EN 13445-3 Anhang O entnommen.

4.2.1. Differenzkoeffizient der Wärmeausdehnung

Der Differenzkoeffizient der Wärmeausdehnung kann nach EN 13445-3 Anhang O mithilfe der polynomischen Koeffizienten c_0 , c_1 und c_2 und der Temperatur T in °C berechnet werden.

$$\beta_{20,T} = c_0 + c_1 * T + c_2 * T^2 \tag{4.8}$$

Mit $c_0 = 15.13$, $c_1 = 1.93 * 10^{-3}$ und $c_2 = -3.33 * 10^{-6}$ ergeben sich für den Wärmeausdehnungskoeffizienten bezogen auf 20°C folgende Werte:



Abbildung 4.12: Wärmeausdehnungskoeffizient - Temperatur Behälter

4.2.2. Dichte

Die Dichte von austenitischen Edelstählen kann nach EN 13445-3 Anhang O aus der Dichte bei Raumtemperatur $\rho_{20} = 7930 \frac{kg}{m^3}$, dem linearen Wärmeausdehnungskoeffizienten $\beta_{20,T}$ und der Temperatur *T* in °C berechnet werden mit:

$$\rho_T = \frac{\rho_{20}}{(1 + \beta_{20,T} * (T - 20))^3}$$
(4.9)

Daraus ergeben sich folgende Werte für die Dichte in Abhängigkeit der Temperatur:



Abbildung 4.13: Dichte - Temperatur Behälter

4.2.3. Thermische Leitfähigkeit

Die thermische Leitfähigkeit λ_T in $\frac{W}{m^{*K}}$ kann nach EN 13445-3 Anhang O mithilfe der polynomischen Koeffizienten c_0 , c_1 und c_2 und der Temperatur T in °C berechnet werden.

$$\lambda_T = c_0 + c_1 * T + c_2 * T^2$$

TU Bibliotheks Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar wien vourknowledge hub The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

Mit $c_0 = 13.98$, $c_1 = 1.502 * 10^{-2}$ und $c_2 = 0$ ergeben sich für die Wärmeleitfähigkeit folgende Werte:



Abbildung 4.14: Wärmeleitfähigkeit - Temperatur Behälter

4.2.4. Enthalpie

Zur Bestimmung der Enthalpie wird die spezifische Wärmekapazität c_p benötigt. Diese kann mit EN 13445-3 Anhang O mithilfe der polynomischen Koeffizienten c_0 , c_1 , c_2 , c_3 und c_4 und der Temperatur *T* in °C berechnet werden.

$$c_p = c_0 + c_1 * T + c_2 * T^2 + c_3 * T^3 + c_4 * T^4$$

Mit $c_0 = 467.77$, $c_1 = 0.24905$, $c_2 = -5.5393 * 10^{-4}$, $c_3 = 8.3266 * 10^{-7}$ und $c_4 = -4.3916 * 10^{-10}$ ergibt sich:



Abbildung 4.15: Wärmekapazität - Temperatur Behälter

Über die spezifische Wärmekapazität kann mithilfe der Dichte und der Temperatur die Enthalpie berechnet werden. Da bei einer einseitig gekoppelten Analyse die Volumenänderung während der Erwärmung und Abkühlung nicht miteinbezogen wird, wird die Enthalpie für diese Analyse auf die Dichte bei 230°C bezogen.

Die Enthalpie bezogen auf die Dichte bei 230°C und reale Enthalpie ergeben sich dadurch zu:



Abbildung 4.16: Enthalpie - Temperatur Behälter

4.2.5. E-Modul

Der Elastizitätsmodul in MPa kann nach EN 13445-3 Anhang O mithilfe der polynomischen Koeffizienten c_0 , c_1 und c_2 und der Temperatur T in °C berechnet werden.

$$E = c_0 + c_1 * T + c_2 * T^2$$

Mit $c_0 = 213.16$, $c_1 = -6.91 * 10^{-2}$ und $c_2 = 0$ ergibt sich für den betrachteten Temperaturbereich folgender Verlauf des E-Moduls über die Temperatur:



Abbildung 4.17: Elastizitätsmodul - Temperatur Behälter

4.2.6. Querkontraktionszahl

Die Querkontraktionszahl wird mit $\nu = 0.3$ als über den Temperaturbereich konstant betrachtet.

4.2.7. Festigkeitskennwerte

Für das plastische Verhalten wird die Streckgrenze aus EN 10028-7 entnommen und als Verfestigungsverhalten Bilinear Kinematic Hardening verwendet. Folgende Werte sind für die Streckgrenze gegeben:



Abbildung 4.18: Fließgrenze-Temperatur Behälter

Der Tangentenmodul E_T wurde über die Temperatur konstant mit 0.01MPa angenommen.

5. Durchgeführte Analysen

Im folgenden Kapitel werden die analysierten Modelle, die durchgeführten Analysen und die Ergebnisse dargestellt und diskutiert.

5.1. Analysierte Modelle

Es wurde ein einfacher, offener Behälter verwendet, sowie ein Behälter mit veränderlichem Querschnitt und ein kreisringförmiger Behälter.

Aufgrund des mit der Größe stark ansteigenden Zeitaufwandes bei der Berechnung wurden nur kleine Behälter analysiert.

Für die thermische Analyse wurde in "Ansys Mechanical" ein Netz mit der Physics Preference "Mechanical" und linearer Ansatzfunktion verwendet, da mit anderen Einstellungen keine konvergente und plausible Lösung erzielt wurde, für die strukturmechanische Analyse mit der Physics Preference "Nonlinear Mechanical" und quadratischer Ansatzfunktion.

Das Netz bei den Kuchenmodellen wurden durch "Sweepen" eines Oberflächennetzes erstellt.

5.1.1. Einfacher, offener Behälter

Die Abmessungen des Behälters sind in Abb.5.1 dargestellt. Dieser Behälter ist nach oben offen und besitzt einen konstanten Querschnitt, wodurch er für Versuche leicht und kostengünstig herstellbar ist. Der Behälterquerschnitt ist kreisförmig. Aufgrund der Symmetrie wurde in der 3D-Analyse nur ein Kuchenmodell simuliert, da sich dadurch die Anzahl der benötigten Elemente und die Rechenzeit verringern.



Abbildung 5.1: Skizze von Behälter 1 (Kuchenmodell)

5.1.2. Behälter mit veränderlichem Querschnitt

Die Abmessungen des Behälters sind in Abb.5.2 dargestellt. Dieser Behälter besitzt einen Querschnitt, welcher sich an der Oberseite verengt. Der Behälterquerschnitt ist kreisförmig. Aufgrund der Symmetrie wurde in der 3D-Analyse nur ein Kuchenmodell simuliert, da sich dadurch die Anzahl der benötigten Elemente und die Rechenzeit verringern.



Abbildung 5.2: Skizze von Behälter 2 (Kuchenmodell)

5.1.3. Ringförmiger Behälter

Die Abmessungen des Behälters sind in Abb.5.3 dargestellt. Dieser Behälter ist nach oben offen und durch die Ringform können die Elemente beim Kuchenmodell mit nahezu konstanter Dicke modelliert werden. Der Behälterquerschnitt ist kreisringförmig. Aufgrund der Symmetrie wurde in der 3D-Analyse nur ein Kuchenmodell simuliert, da sich dadurch die Anzahl der benötigten Elemente und die Rechenzeit verringern.



Abbildung 5.3: Skizze von Behälter 3 (Kuchenmodell)

5.1.4. Kontakt zwischen PCM und Behälter

In [18] wurde der Kontakt als perfekt, ohne Schlupf durch unterschiedliche Schubspannungen zwischen PCM und Behälter modelliert. Dadurch würden aber

Effekte wie Spaltbildung durch Ablösung des festen PCM vom Behälter nicht modellierbar sein. Daher wurde wie in [16] ein reibungsbehafteter Kontakt mit folgenden Einstellungen gewählt:

Definition	
Туре	Frictional
Friction Coefficient	0,2
Scope Mode	Manual
Behavior	Program Controlled
Trim Contact	Program Controlled
Suppressed	No
Display	
Advanced	
Formulation	Pure Penalty
Small Sliding	On
Detection Method	Nodal-Projected Normal From Contact
Penetration Tolerance	Program Controlled
Elastic Slip Tolerance	Program Controlled
Normal Stiffness	Program Controlled
Update Stiffness	Each Iteration
Stabilization Damping Factor	0,
Pinball Region	Program Controlled
Time Step Controls	Automatic Bisection
Geometric Modification	
Interface Treatment	Add Offset, No Ramping
Offset	0, mm

Abbildung 5.4: Einstellungen für den Kontakt zwischen Behälter und PCM

5.2. Thermische Analyse

Das PCM wurde von einer Ausgangstemperatur von 230°C auf eine Temperatur von 200°C abgekühlt. Dazu wurde an der unteren Fläche des Behälters (siehe Anhang 7.2.1.) innerhalb von 10 Sekunden die Temperatur auf 200°C gesenkt und anschließend konstant gehalten, bis das PCM vollständig auf 200°C abgekühlt ist. Anschließend wird die Temperatur der Fläche innerhalb von 10 Sekunden auf 230°C erhöht und konstant gehalten, bis das PCM vollständig auf 230°C erwärmt ist. Alle anderen Flächen wurden als ideal wärmegedämmt angenommen. (siehe Anhang 7.2.1.). Bei allen drei Behältern beginnt die Abkühlung nach 5 Sekunden. Das Erwärmen beginnt bei Behälter 1 nach 135 Sekunden, bei Behälter 2 nach 125 Sekunden und bei Behälter 3 nach 120 Sekunden.

Die Zeitschrittweite während der Analyse wurde von "Ansys" automatisch gewählt, wobei die maximale Zeitschrittweite 0.1s, die minimale 0.001s und die Anfangszeitschrittweite 0.01s beträgt. Zur Verbesserung der Konvergenz wurde ein Line-Search-Algorithmus für die Analyse eingeschaltet. Die Vernetzung wurde mit den Voreinstellungen "Mechanisch – linear" und einer Elementgröße von 0.25mm erzeugt. Mit anderen Voreinstellungen für die Vernetzung wurden keine konvergenten oder plausiblen Lösungen erzielt.

Da für den Wärmeübergangskoeffizienten zwischen PCM und Behälter keine Werte bekannt sind, wurde die Option gewählt, dass dieser von "Ansys" berechnet wird. Dabei wird die Wärmeleitfähigkeit auf einen ausreichend hohen Wert gesetzt, sodass der Kontakt einen minimalen thermischen Widerstand besitzt.

Bei der thermischen Analyse können keine Effekte wie z.B. Spaltbildung zwischen Behälter und PCM oder Strömungen im flüssigen PCM berücksichtigt werden.

Der Anteil an festem und flüssigem PCM lässt sich nicht direkt darstellen, sondern kann nur indirekt aus der Temperatur gefolgert werden.

Da Sprünge in den Werkstoffkennwerten nicht dargestellt werden können, kommt es zu einer Oszillation der Schmelzfront (grüner Bereich) in Abhängigkeit von der Netzfeinheit (siehe Abb.5.5). Dabei vergrößert und verkleinert sich die Erstarrungsfront, während sie das Material durchwandert. In der Simulation wurden drei Blöcke mit einer Länge von 10mm, einer Dicke von 1mm und einer Höhe von 4mm mit unterschiedlich feinen Netzen (Elementgröße: 0.25mm, 0.5mm und 1mm) analysiert. Die Anfangstemperatur beträgt 230°C. Anschließend wurde die rechte Fläche auf 200°C abgekühlt und die Temperatur während der Analyse konstant gehalten. Zwischen den Blöcken kommt es zu keiner Wärmeleitung. Um die Schmelzfront ausreichend genau beschreiben zu können, sollte das Netz daher möglichst fein sein.



Abbildung 5.5:Schmelzfront in Abhängigkeit von der Netzfeinheit

In Anhang 7.3.1. ist für die Behälter der Verlauf der maximalen und minimalen Temperatur über die Zeit dargestellt. Daraus ist zu erkennen, dass es am Schmelzpunkt zu einem Haltepunkt kommt, an dem die maximale und minimale Temperatur über einen großen Zeitraum annähernd konstant bleiben. Aufgrund der geringeren Temperaturdifferenz zwischen der maximalen Temperatur und der Schmelztemperatur im Vergleich zur Differenz minimale Temperatur und Schmelztemperatur dauert das Schmelzen aufgrund des daraus resultierenden geringeren Wärmestroms länger.

Die Schmelzfront und Temperaturverteilung (in [°C]) sind für alle Modelle für mehrere Zeitpunkte in den folgenden Abbildungen dargestellt. Dabei ist in der Darstellung der Schmelzfront das blaue PCM vollständig erstarrt, während das rot dargestellte PCM flüssig ist und sich das grün dargestellte PCM in der Übergangsphase befindet. Es treten geringfügige lokale Abweichungen zwischen Kuchenmodell und axialsymmetrischem Modell auf, welche auf Unterschiede in der Elementierung zurückzuführen sind.

Die Schmelz- bzw. Erstarrungsfront vergrößert sich mit der Zeit. Dies liegt daran, dass kein Schmelzpunkt dargestellt werden konnte, sondern nur ein Schmelzintervall, wodurch es am Schmelzpunkt zwischen fester und flüssiger Phase zu Wärmeleitung kommt. Im realen Werkstoff ist die Schmelzfront eine dünne Linie, die sich durch den Werkstoff bewegt. Mit größer werdendem Behälter nimmt auch die Abweichung zwischen Realität und Simulation zu, da die Schmelzfront immer größer wird. Dies liegt daran, dass der Temperaturgradient mit dem Weg, den die Schmelzfront zurücklegt, zunimmt. An Stellen mit unregelmäßiger Vernetzung (z.B. Rundungen) ist die Schmelzfront außerdem unregelmäßig. Die Vernetzung sollte daher mit möglichst gleichmäßigen Elementen erfolgen.

Bei der Vernetzung muss ein Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenzeit eingegangen werden. Grundsätzlich sollte bei Erstarrungsvorgängen die Elementgröße so gering sein, dass in der Schmelzfrontdicke mehrere Elemente vorhanden sind. Dies würde allerdings bei großen Behältern die Rechenzeit stark erhöhen.

Bei Behälter 2 ist beim Abkühlen flüssiges PCM nach ca. 21 Sekunden vollständig von festem PCM umschlossen. Beim Schmelzen befindet sich nach ca. 150 Sekunden zwischen festem PCM und Behälter eine Schicht flüssiges PCM.



Behälter 1 - Axialsymmetrisch:







Abbildung 5.6: Verlauf der Schmelzfront und der Temperaturverteilung in Behälter 1 (axialsymmetrisch)



Behälter 1 - Kuchenmodell:







Abbildung 5.7: Verlauf der Schmelzfront und der Temperaturverteilung in Behälter 1 (Kuchenmodell)



Behälter 2 - Axialsymmetrisch:



Seite 46



Abbildung 5.8: Verlauf der Schmelzfront und der Temperaturverteilung in Behälter 2 (axialsymmetrisch)



Behälter 2 - Kuchenmodell:





Abbildung 5.9: Verlauf der Schmelzfront und der Temperaturverteilung in Behälter 2 (Kuchenmodell)

Seite 50



Behälter 3 - Axialsymmetrisch:



Abbildung 5.10: Verlauf der Schmelzfront und der Temperaturverteilung in Behälter 3 (axialsymmetrisch)



Behälter 3 - Kuchenmodell:



Abbildung 5.11: Verlauf der Schmelzfront und der Temperaturverteilung in Behälter 3 (Kuchenmodell)

5.3. Mechanische Analyse

Im ersten Schritt der mechanischen Analyse wurde die Gravitationsbelastung aufgebracht, sowie der Umgebungsdruck von 0.1MPa. Dies geschieht innerhalb der ersten 5 Sekunden durch Aufbringen einer entsprechenden Beschleunigung. Während dieser Zeit ist die Temperatur des Behälters und PCM konstant mit 230°C. Erst im Anschluss wird mit der Temperaturabsenkung an der Unterseite begonnen und das PCM beginnt abzukühlen und zu erstarren (siehe Anhang 7.2.). Der Umgebungsdruck

wurde dabei auf alle freien Flächen aufgebracht. Flächen, die erst während des Erstarrens durch Spaltbildung zu freien Flächen werden, konnten beim Druck nicht berücksichtigt werden.

Solver Type	Program Controlled
Weak Springs	On
Spring Stiffness	Program Controlled
Solver Pivot Checking	Program Controlled
Large Deflection	On
Inertia Relief	Off
Quasi-Static Solution	On
Rotordynamics Controls	
Restart Controls	
Nonlinear Controls	the second s
Newton-Raphson Option	Program Controlled
Force Convergence	Program Controlled
Moment Convergence	Program Controlled
Displacement Convergence	Program Controlled
Rotation Convergence	Program Controlled
Line Search	On
Stabilization	Off

Folgende Solvereinstellungen wurden vorgenommen:

Abbildung 5.12: Solvereinstellungen für die mechanische Analyse

Zur Verbesserung der Konvergenz wurden "Weak Springs", "Quasi-Static Solution" und ein "Line-Search-Algorithmus" eingeschaltet, sowie "Stabilization" ausgeschaltet. Da große Deformationen auftreten können, wurde "Large-Deflection" eingeschaltet. Die Zeitschrittgröße wurde automatisch festgelegt, wobei der Anfangszeitschritt und der maximale Zeitschritt mit 0.01s festgelegt wurden und der minimale Zeitschritt mit 10^{-6} Sekunden.

Um den für die Ergebnisse der Simulation benötigten Speicherplatz gering zu halten, wurden die Ergebnisse der Analyse zu jeder vollen Sekunde abgespeichert.

5.3.1. Bilinear Isotropic Hardening

Da das Modell die Lunkerbildung nicht simulieren kann, kann nur durch Vergleich der thermischen mit der mechanischen Analyse abgeschätzt werden in welchen Bereichen Lunkerbildung auftritt. Folgende Kriterien müssen für die Entstehung von Lunkern vorhanden sein:

- Das Material ist lokal noch flüssig
- Es wirken Zugspannungen auf das PCM (siehe Abb. 5.14-5.21)

Während des Erstarrens bildet sich im PCM bei Behälter 1 und 3 ein Trichter aus. Dieser bleibt auch beim wieder geschmolzenen Material vorhanden, da es nicht möglich war eine konvergente Lösung mit sehr niedrigen Festigkeitskennwerten zu erzielen, bei denen sich der Trichter durch das Eigengewicht zurückbilden würde. (Abb. 5.15, 5.19, 5.21)

Bei im Vergleich zum Durchmesser großen Höhen, kann es zu einer Invertierung der Elemente kommen (siehe Abb.5.13). Das PCM ist dabei in diesem Bereich vollständig erstarrt und auf 200°C abgekühlt. Ein Grund ist, dass das PCM lokal im Inneren noch flüssig ist und im Vergleich zur Festigkeit hohe Zugspannungen auftreten, welche aufgrund der Volumenkonstanz durch Fließen nicht ausgeglichen werden können. In

den flüssigen Bereichen mit Zugspannungen würden sich im realen Material Lunker bilden.



Abbildung 5.13: Invertierung der Elemente in der Behältermitte

Das Modell ist nur für Erstarrungsprozesse geeignet, bei denen am Ende eine freie Oberfläche erstarrt. Ist flüssiges PCM vollständig von erstarrtem PCM umschlossen, so liefert dieses Modell aufgrund der fehlenden Simulation von Lunkern keine realistischen Ergebnisse (z.B. bei Behälter 2), da es zu großen Verformungen von bereits erstarrtem PCM kommt.

In den Spannungsverläufen (siehe Anhang 7.3.) ist ersichtlich, dass im Behälter beim Erwärmen und Abkühlen Spannungsspitzen auftreten. Dies liegt an den Temperaturunterschieden durch Abkühlen der unteren Fläche. Aufgrund unzureichender Diskretisierung kommt außerdem Oszillationen es zu im Spannungsverlauf des PCM.

Im PCM sind die Vergleichsspannungen in jenen Bereichen am größten, die zuerst erstarren. In diesen Bereichen treten auch Druckspannungen auf. Die maximalen Schubspannungen in XY-Ebene treten in den Bereichen auf, die am Ende erstarren, da hier flüssiges PCM in der Realität nachfließen würden, dieses Verhalten jedoch bei strukturmechanischen Finiten Elementen zu Schubspannungen führt.

Bei Behälter 3 treten aufgrund der stärkeren Wärmeausdehnung des PCM in Umfangrichtung im Behälter an der Innenseite die größten Spannungen auf und an dieser Stelle bildet sich zwischen PCM und Behälter kein Spalt. (Abb. 5.18 – 5.21)

Bei Behälter 3 zeigen sich zwischen Kuchenmodell und axialsymmetrischem Modell geringe Abweichungen. Außerdem treten beim Kuchenmodell Schubspannungen in YZ- und XZ-Ebene auf (siehe Anhang 7.3.2.). Diese sollten jedoch aufgrund der Rotationssymmetrie null sein. Im Vergleich zur Schubspannung in XY-Ebene sind diese zwar klein, allerdings nicht vernachlässigbar. Bei Behälter 1 und 2 wurde

aufgrund schlechter Elementierung in der Mitte bei den Kuchenmodellen keine plausible Lösung erzielt.

In den folgenden Abbildungen sind verschiedene für das Werkstoffgesetz relevante Kenngrößen für bestimmte Zeitpunkte ausgewertet. Diese geben Auskunft, ob Fließen eingetreten ist, wie groß die Verformungen sind und an welchen Stellen Lunkerbildung auftreten könnte.



Behälter 1 - Axialsymmetrisch:







Abbildung 5.14: Vergleichsspannung und hydrostatische Spannung - Behälter 1 (axialsymmetrisch)











Behälter 1 - Kuchenmodell:

Bei diesem Behälter wurden aufgrund der schlechten Elementierung in der Mitte keine plausiblen Ergebnisse erzielt. Aufgrund des spitzen Keils entstehen Elemente mit großen Seitenverhältnissen und es treten Locking-Effekte auf, wodurch sehr große Spannungen im PCM entstehen, welche die Bedingung der Rotationssymmetrie nicht erfüllen.










Abbildung 5.16:Vergleichsspannung und hydrostatische Spannung - Behälter 2 (axialsymmetrisch)







Abbildung 5.17: Schubspannung und Verformung - Behälter 2 (axialsymmetrisch)

Behälter 2 – Kuchenmodell:

Es treten wie bei Behälter 1 Locking-Effekte auf.







Abbildung 5.18: Vergleichsspannung und hydrostatische Spannung - Behälter 3 (axialsymmetrisch)





Abbildung 5.19: Schubspannungen und Verformungen - Behälter 3 (axialsymmetrisch)







Abbildung 5.20: Vergleichsspannung und hydrostatische Spannung - Behälter 3 (Kuchenmodell)



Seite 75



Abbildung 5.21: Schubspannungen und Verformungen - Behälter 3 (Kuchenmodell)

5.3.2. Gurson-Tvergaard-Needleman

Es bildet sich wie bei Bilinear Isotropic Hardening ein Trichter. Dieser ist aufgrund der Lunkerbildung im Material jedoch nicht so stark ausgeprägt. Die Lunkerbildung ist in der Mitte des PCM am größten, da diese Stelle zuletzt erstarrt, wodurch in diesem Bereich Zugspannungen auftreten. (siehe Abb.5.22-5.30) Am Rand des PCM treten Druckspannungen auf.

Der Lunkeranteil im Material kann mit den gewählten Werkstoffwerten auch negativ werden, da aufgrund der Anfangsporosität das Material kompressibel ist. Zwischen Behälter und erstarrtem PCM bildet sich ein Spalt aus, dieser ist jedoch aufgrund der Lunkerbildung kleiner als bei Bilinear Isotropic Hardening.

Beim Aufschmelzen bilden sich die entstandenen Lunker und Verformungen nicht vollständig zurück, da dafür die Belastungen durch Druck und Gravitation zu gering sind. (siehe Abb. 5.22. - 5.30)

Aufgrund der Lunkerbildung eignet sich dieses Werkstoffgesetz auch für Behälter, bei denen während der Erstarrung flüssiges PCM vollständig von festem PCM umschlossen ist (Behälter 2). Bei Behältern, bei denen am Ende des Erstarrungsprozesses eine freie Oberfläche erstarrt, ist die durch Simulation vorhergesagte Lunkerbildung allerdings größer als die tatsächliche, da flüssiges PCM nicht nachfließen kann und es dadurch im eigentlich noch flüssigen Bereich zu Spannungen und Dehnungen kommt, welche in der Bildung von Lunkern resultieren.

Aufgrund der Lunkerbildung und der damit verbundenen Volumenzunahme kommt es bei Behälter 2 im eigentlich flüssigen Zustand des PCM zu relativ großen Spannungen im Behälter. (Abb. 5.25 t=260s)

In den folgenden Abbildungen sind verschiedene Kenngrößen für bestimmte Zeitpunkte ausgewertet. Diese geben Auskunft, ob Fließen eingetreten ist, wie groß der Lunkeranteil im Material ist und wie groß die Verformungen sind. Die Vergleichsspannung ist in Bereichen, welche am Beginn erstarren am größten.

Behälter 1 - Axialsymmetrisch:







Abbildung 5.22: Vergleichsspannung und -dehnung von-Mises - Behälter 1 (axialsymmetrisch)







Abbildung 5.23: Schubspannungen und Verformungen - Behälter 1 (axialsymmetrisch)







Abbildung 5.24: Lunkeranteil und hydrostatische Spannung - Behälter 1 (axialsymmetrisch)

Behälter 1 - Kuchenmodell:

Diese Simulation wurde aufgrund der Probleme wie bei Bilinear Isotropic Hardening nicht durchgeführt.









Abbildung 5.25: Vergleichsspannung und -dehnung - Behälter 2 (axialsymmetrisch)







Abbildung 5.26: Schubspannungen und Verformungen - Behälter 2 (axialsymmetrisch)







Behälter 2 - Kuchenmodell:

Diese Simulation wurde aufgrund der Probleme wie bei Bilinear Isotropic Hardening nicht durchgeführt.













Abbildung 5.29: Schubspannungen und Verformungen - Behälter 3 (axialsymmetrisch)





Abbildung 5.30: Lunkeranteil und hydrostatische Spannung - Behälter 3 (axialsymmetrisch)

Behälter 3 - Kuchenmodell:

Mit diesem Modell wurde keine konvergente Lösung erzielt.

5.3.3. Menetrey William

Es kommt zur Ausbildung eines Trichters, dieser ist jedoch sehr gering. Beim Fließen kommt es zu einer Vergrößerung des Volumens und dadurch werden Lunker simuliert. Da sich die Volumenänderung beim Schmelzen nur elastisch zurückbildet, werden im flüssigen Zustand bei Behälter 2 hohe Spannungswerte vorhergesagt, welche jedoch nicht plausibel sind. Dies liegt auch an dem relativ großen Elastizitätsmodul und daran, dass unter hydrostatischem Druck kein Fließen auftritt (Abb. 5.34, Anhang 7.34).

Wie bei GTN entstehen auch hier die meisten Lunker in der Mitte und der vorhergesagte Lunkeranteil ist aufgrund von fehlendem Nachfließen von flüssigem PCM größer als in der Realität. (siehe Abb.5.34-5.35 und Anhang 7.3.4.)

Durch die Simulation der Lunker mittels Volumenvergrößerung ist dieses Modell geeignet das Erstarren in Behälter zu simulieren, bei denen beim Erstarren flüssiges PCM vollständig von festem PCM umschlossen ist. Durch die beim Schmelzen entstehenden Schubspannungen und den damit verbundenen Verformungen nimmt die Volumenausdehnung und der Lunkeranteil im Material beim Schmelzen zu, was jedoch der Realität widerspricht. (Abb.5.36 und Anhang 7.3.4.)

Der gebildete Spalt zwischen PCM und Behälter ist bei diesem Werkstoffgesetz am geringsten.

Bei Behälter 3 zeigen sich zwischen Kuchenmodell und axialsymmetrischem Modell geringfügige Abweichungen und es treten im Kuchenmodell auch in YZ- und XZ-Ebene Schubspannungen auf, welche aufgrund der Symmetrie jedoch null sein sollten.

In den folgenden Abbildungen sind verschiedene Kenngrößen für bestimmte Zeitpunkte ausgewertet. Diese geben Auskunft, ob Fließen eingetreten ist, wie groß der Lunkeranteil im Material ist und wie groß die Verformungen sind.



Behälter 1 - Axialsymmetrisch:




Abbildung 5.31:Hydrostatische Spannung und Vergleichsspannung - Behälter 1 (axialsymmetrisch)





Seite 103



Abbildung 5.32:Spannungskoordinate θ und Schubspannungen - Behälter 1 (axialsymmetrisch)



TU Bibliotheks Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar WLEN vourknowledge hub. The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.







Abbildung 5.33:Lunkeranteil und Verformungen - Behälter 1 (axialsymmetrisch)

Behälter 1 - Kuchenmodell:

Diese Simulation wurde aufgrund der Probleme wie bei Bilinear Isotropic Hardening nicht durchgeführt.

Behälter 2 - Axialsymmetrisch:









Abbildung 5.34:Hydrostatische Spannung und Vergleichsspannung - Behälter 2 (axialsymmetrisch)









Abbildung 5.35:Spannungskoordinate θ und Schubspannungen - Behälter 2 (axialsymmetrisch)









Abbildung 5.36: Lunkeranteil und Verformung - Behälter 2 (axialsymmetrisch)

Behälter 2 - Kuchenmodell:

Diese Simulation wurde aufgrund der Probleme wie bei Bilinear Isotropic Hardening nicht durchgeführt.

Behälter 3 - Axialsymmetrisch:







Abbildung 5.37: Spannungskoordinaten ξ und ρ_{S} - Behälter 3 (axialsymmetrisch)







Abbildung 5.38: Spannungskoordinate θ und Schubspannungen - Behälter 3 (axialsymmetrisch)







Abbildung 5.39: Lunkeranteil und Verformungen - Behälter 3 (axialsymmetrisch)









Abbildung 5.40: Hydrostatische Spannung und Vergleichsspannung - Behälter 3 (Kuchenmodell)











Abbildung 5.42: Lunkeranteil und Verformungen - Behälter 3 (Kuchenmodell)

5.4. Zusammenfassung der Ergebnisse und Schlussfolgerung

5.4.1. Rechenzeiten der Analyse

Für die Analyse wurden maximal vier Kerne der CPU (AMD Ryzen 7 5800X, 3.80 GHz) verwendet. Der Arbeitsspeicher beträgt 32 GB. In den folgenden Tabellen ist die Rechenzeit der einzelnen Analysen dargestellt.

Thermische Analyse – Rechenzeit [min:sec]					
Behälter 1 Behälter 2 Behälter 3					
Axialsymmetrisch	0:59	1:04	1:17		
Kuchenmodell 1:28 1:25 1:53					
Tabelle 5-1: Rechenzeit der Thermischen Analyse Imin:soci					

 Tabelle 5-1: Rechenzeit der Thermischen Analyse [min:sec]

Bilinear Isotropic Hardening – Rechenzeit [min:sec]					
Behälter 1 Behälter 2 Behälter 3					
Axialsymmetrisch	40:58	54:58	20:58		
Kuchenmodell - 71:00					
TI U E A D U					

Tabelle 5-2: Rechenzeit der mechanischen Analyse [min:sec] - Bilinear Isotropic Hardening

Gurson-Tvergaard-Needleman – Rechenzeit [min:sec]					
Behälter 1 Behälter 2 Behälter 3					
Axialsymmetrisch	64:00	68:00	21:48		
Kuchenmodell					
Taballa E 2: Daabanzait day maabaniaaban Analysa Iminyaaal OTN					

Tabelle 5-3: Rechenzeit der mechanischen Analyse [min:sec] - GTN

Menetrey-William – Rechenzeit [min:sec]				
Behälter 1 Behälter 2 Behälter 3				
Axialsymmetrisch	106:00	87:00	48:28	
Kuchenmodell	-	-	111:00	

Tabelle 5-4: Rechenzeit der mechanischen Analyse [min:sec] - MW

5.4.2. Effekte während des Erstarrungs- und Schmelzvorgangs

In der Schmelzfront treten in Abhängigkeit von der Netzfeinheit Oszillationen in den Ergebnissen auf. Um diese zu vermeiden, sollte daher das Netz an den Randbereichen möglichst fein gewählt werden, was allerdings die Rechenzeit bei großen Behältern stark vergrößert. Aufgrund der Wärmeleitung vergrößert sich die Schmelzfront mit der Zeit, wodurch auch die Elementgröße der Vernetzung in der Mitte der Behälter größer gewählt werden kann. Um die Vergrößerung der Schmelzfront zu verringern und dadurch das reale Verhalten besser anzunähern, sollte das Temperaturintervall für den Schmelzpunkt möglichst klein gewählt werden. Das kann jedoch zu Konvergenzproblemen führen.

Bei allen drei verwendeten Werkstoffgesetzen kommt es aufgrund der verwendeten Kontaktart zur Bildung eines Spalts. Die Lunkerbildung lässt sich nur mit den Werkstoffmodellen von Gurson-Tvergaard-Needleman direkt und von Menetry-William indirekt durch Volumenvergrößerung beim Fließen simulieren. Mit Bilinear Isotropic Hardening lässt sich die Lunkerbildung nicht simulieren, sondern lediglich auf Orte schließen, an denen Lunkerbildung auftreten könnte. Durch die großen Verformungen aufgrund der Zugspannungen kann es zu einer Invertierung der Elemente bei größerer Behälterhöhe kommen. Da das PCM spröde ist, haben Fehlstellen einen großen Einfluss auf die Festigkeitswerte. Dieser Einfluss kann durch geeignetes Erweichungsverhalten simuliert werden, jedoch sind dafür nicht ausreichend Werkstoffkennwerte vorhanden.

Zwischen Kuchenmodellen und axialsymmetrischen Modellen treten geringe Abweichungen auf. Außerdem kommt es in den Kuchenmodellen in YZ- und XZ-Ebene zu Schubspannungen, welche jedoch null sein sollten. Sie sind zwar klein im Vergleich zu den Schubspannungen in XY-Ebene, jedoch nicht vernachlässigbar.

Bilinear Isotropic Hardening ist für Behälter, bei denen während des Erstarrungsvorgangs flüssiges PCM vollständig von festem PCM umschlossen ist, ungeeignet, da es aufgrund der fehlenden Möglichkeit der Lunkerbildung zu großen Verformungen von bereits erstarrtem PCM kommt. Dieses Modell kann daher lediglich für Behälter verwendet werden, bei denen am Ende des Erstarrungsprozesses eine freie Oberfläche erstarrt und deswegen die Lunkerbildung sehr gering ist.

Da es zum Erzielen einer konvergenten Lösung nicht möglich war, die Werkstoffwerte im flüssigen Zustand ausreichend abzusenken, bilden sich Verformungen und Lunker, welche sich während des Erstarrungsvorgangs gebildet haben, beim erneuten Schmelzen nicht mehr vollständig zurück. Dadurch entstehen teilweise auch im flüssigen Zustand im Behälter große Spannungen.

Die Bildung eines Trichters bei Behälter 1 wie in Abb.2.1 wurde nur durch Bilinear Isotropic Hardening erfasst. Grund hierfür ist, dass das Volumen beim Fließen konstant bleibt. Da ein Nachfließen von flüssigem PCM mit strukturmechanischen Finiten Elementen nicht simuliert werden kann, kommt es aufgrund der dadurch auftretenden Spannungen und Dehnungen bei MW und GTN zu einer Volumenvergrößerung. Dadurch ist der Trichter nicht so stark ausgeprägt und es entstehen Lunker an dieser Stelle.

Da die sprunghaften Änderungen in den Werkstoffwerten nicht dargestellt werden können, treten in der Schmelzfront Oszillationen auf, und aufgrund zu geringer Diskretisierung kommt es zu einem teilweise sprunghaften Verlauf der Spannungen (siehe Anhang).

Folgende Effekte lassen sich mit einer strukturmechanischen Analyse nicht darstellen, welche jedoch im Realen auftreten:

- Strömungseffekte im flüssigen PCM aufgrund von Dichteunterschieden und Nachfließen von PCM
- Der Einfluss von Lunkern auf die Wärmeleitfähigkeit
- Das reale Verhalten der Schmelzfront, aufgrund der Beschränktheit der Ansatzfunktionen

5.4.3. Vergleich der Werkstoffgesetze

Von den drei Werkstoffgesetzen ist keines in der Lage, die im PCM während des Erstarrens und Schmelzens auftretenden Vorgänge vollständig zu beschreiben. Jedes der Modelle bietet unterschiedliche Vor- und Nachteile.

Der Vorteil von Bilinear Isotropic Hardening ist die Einfachheit, da nur ein Tangentenmodul und die Fließgrenze benötigt werden und dieses Modell in der Anwendung am unkompliziertesten ist. Jedoch können wesentliche Eigenschaften wie die Unterschiede in Zug- und Druckfestigkeit sowie die Bildung von Lunkern nicht simuliert werden, wodurch dieses Modell für die Anwendung zur Abschätzung der Belastungen auf einen mit PCM gefüllten Behälter nicht gut geeignet ist, sondern lediglich zur Vorhersage von Stellen, an denen sich im PCM Lunker bilden. Lediglich bei Erstarrungsvorgängen, bei denen sich aufgrund der Geometrie nur sehr wenige Lunker bilden, ist dieses Modell geeignet.

Der Vorteil des GTN Modells ist, dass es die Lunkerbildung simulieren kann, sowie den Einfluss der Lunker auf das Festigkeitsverhalten und ein Versagen bei Erreichen der kritischen Porosität darstellen kann. Von Nachteil ist, dass viele Parameter bestimmt werden müssen, was einen hohen zeitlichen und finanziellen Aufwand bedeutet und bei diesem Modell häufig Konvergenzprobleme auftreten. Die Unterschiede in Zug- und Druckfestigkeit können durch dieses Modell jedoch nicht berücksichtigt werden. Die Lunker führen im Material zu einer Kompressibilität. Aufgrund der Fähigkeit die Lunkerbildung und Lunkerrückbildung zu simulieren, was ein wesentlicher Effekt bei der Phasenumwandlung ist, ist dieses Modell am besten geeignet, einen Zyklus aus Erstarren und Schmelzen zu simulieren.

Das Menetrey-William Modell ist in der Lage die Unterschiede in Zug- und Druckfestigkeit, sowie indirekt die Lunkerbildung über eine Vergrößerung des Volumens zu simulieren. Außerdem benötigt dieses Modell nur wenige Werkstoffparameter. Die Handhabung gestaltet sich aber schwieriger als die von Bilinear Isotropic Hardening. Da die Lunker nicht mehr zurückgebildet werden, ist dieses Modell nur zur Simulation des Erstarrens gut geeignet. Aufgrund der Volumenvergrößerung durch Schubspannungen vergrößert sich das Volumen und der Lunkeranteil auch während des Schmelzens. Da Fließen unter hydrostatischem Druck nicht auftritt, ist die Verringerung des Volumens auch nur elastisch, wodurch hohe Druckspannungen auftreten.

Das bei GTN und MW auftretende Problem, dass bei Behälter 2 die Spannungen im Behälter im vollständig geschmolzenen Zustand relativ hoch sind, könnte durch Ergänzen von thermischer Regeneration vermindert werden, bzw. durch ein entsprechendes Erweichungsverhalten von Bereichen, in denen es zur Lunkerbildung kommt.

6. Literaturverzeichnis

- [1] Ansys® Academic Research Mechanical Release 2020R2: Help System: Geomechanics, ANSYS, Inc.
- [2] Ansys® Academic Research Mechanical Release 2020R2: Help System: Porous Elasticity, ANSYS, Inc.
- [3] Ansys® Academic Research Mechanical Release 2020R2: Help System: Rate Independent Plasticity, ANSYS, Inc.
- [4] Bartlett S.: Mohr-Coulomb Model; 2010
- [5] Bauer T., Laing D., Tamme R.: Overview of PCMs for concentrated solar power in the temperature range 200 to 350 °C; 2010, Advances in Science and Technology Vol. 74
- [6] Bauer T., Pfleger N., Laing D., Steinmann W., Eck M., Kaesche S.: High temperature molten salts for solar power application; 2013, Elsevier
- [7] Bernauer G., Brocks W., Mühlich U., Steglich D., Werwer M.: Hinweise zur Anwendung des Gurson-Tvergaard-Needleman-Modells; 1999, GKSS-Forschungszentrum Geesthacht
- [8] Chen W.: Constitutive Equations for Engineering Materials, Volume 1&2; 1994, Elsevier
- [9] Chen W., Han D.: Plasticity for Structural Engineers; 1988, Springer Verlag
- [10] Cricrì G.: A consistent use of the Gurson-Tvergaard-Needleman damage model for the R-curve calculation; 2009, www.researchgate.net/publication/239537039_A_consistent_use_of_the_Gurson-Tvergaard-Needleman damage model for the R-curve calculation
- [11] Devi D.: On the determination of modified cam clay model parameters; 2013, IJIRSET
- [12] Du X., Cheng X., Gao M., Determination of the parameters of Modified Cam-Clay model for paddy grain; 2017, Elsevier Ltd.
- [13] European Committee for Standardization: Flacherzeugnisse aus Druckbehälterstählen – Teil 7: Nichtrostende Stähle; EN 10028-7, 2016
- [14] Hao S., Brocks W.: The Gurson-Tvergaard-Needleman-model for rate and temperature-dependent materials with isotropic and kinematic hardening; 1997, Springer Verlag, Computational Mechanics 20, 34-40
- [15] Iverson B., Broome S., Siegel N.: Temperature dependent mechanical property testing of nitrate thermal storage salts; 2012, Sandia National Laboratories
- [16] Kerschbaum B.: Strukturmechanische Berechnungen von Behältnissen für Phasenwechselmaterialien; 2021, TU Wien
- [17] Maldonado J., Fullana-Puig M., Martín M., Solé A., Fernández A., de Gracia A., Cabeza L.: Phase Change Material Selection for Thermal Energy Storage at High Temperature Range between 210 °C and 270 °C; 2018, www.mdpi.com/1996-1073/11/4/861
- [18] Kolb G., Ho C., Iverson B., Moss T., Siegel N.: Freeze-thaw tests on through receivers employing a molten salt working fluid; 2010, ASME
- [19] Rahimidehgolan F., Majzoobi G., Alinejad F., Sola J.: Determination of the Constants of GTN Damage Model Using Experiment, Polynomial Regression and Kriging Methods; 2017; www.mdpi.com/2076-3417/7/11/1179
- [20] Schweizerhof K.: Umformsimulation: Herausforderungen und Strategien für genauere Prognosen bei hochfesten Stählen
- [21] Sedeh M., Khodadadi M.: Solidification of Phase Change Materials Infiltrated in Porous Media in Presence of Voids; 2014, ASME

- [22] Serrano-López R., Fradera J., Cuesta-López S.: Molten salts database for energy applications; 2013, www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0255270113001827
- [23] Shuku T., Murakami A., Nishimura S., Fujisawa K., Nakamura K.; Parameter identification for Cam-clay model in partial loading model tests using the particle filter; 2012, Elsevier B.V.
- [24] Wikimedia Commons: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/0/00/HaightWestergaard_en.svg
- [25] ZACE Services Ltd: Advanced model for soft soils. Modified Cam-Clay (MCC), 2011
- [26] European Committee for Standardization: Unbefeuerte Druckbehälter Teil 3: Konstruktion, EN 13445-3, 2015

7. Anhang

7.1. Werkstoffkennwerte

7.1.1. Behälter

Werkstoff: X5CrNi18-10

Temperatur	Wärmeausdehnungskoeffizient	Dichte	Wärmeleitfähigkeit	Enthalpie
[°C]	diff. T _{bez} =20°C [1/°C]	[kg/m³]	[W/mK]	bezogen auf
				ρ _{230°} c [J/m³]
190	1.65165E-05	7863.57	16.8338	667284060.1
200	1.65828E-05	7859.41	16.984	708160202.9
205	1.66157E-05	7857.31	17.0591	728648290.4
210	1.66484E-05	7855.22	17.1342	749169163.9
215	1.6681E-05	7853.11	17.2093	769722462.6
220	1.67134E-05	7851.00	17.2844	790307870.5
222	1.67263E-05	7850.16	17.31444	798550961.7
225	1.67457E-05	7848.88	17.3595	810925115.0
230	1.67777E-05	7846.76	17.4346	831573965.9
235	1.68097E-05	7844.63	17.5097	852254233.8
240	1.68414E-05	7842.50	17.5848	872965768.7
250	1.69044E-05	7838.21	17.735	914482230.5

Tabelle 7-1: Werkstoffkennwerte X5CrNi18-10

Temperatur	E-Modul	Querkontraktionszahl
[°C]	[Mpa]	[-]
190	185548	0.3
200	184700	0.3
205	184276	0.3
210	183852	0.3
215	183428	0.3
220	183004	0.3
222	182834	0.3
225	182580	0.3
230	182156	0.3
235	181732	0.3
240	181308	0.3
250	180460	0.3

Tabelle 7-2: Werkstoffkennwerte X5CrNi18-10

Temperatur	Dehngrenze Rp _{0,2}
	[MPa]
150	142
200	127
250	118

Tabelle 7-3: Werkstoffkennwerte X5CrNi18-10

7.1.2. PCM

Werkstoff: Eutektisches KNO3-NaNO3, 54wt%-46wt%

Temperatur	Dichte	Wärmeleitfähig-	Enthalpie	Wärmeausdehnungsko-
[°C]	[kg/m³]	keit [W/mK]	bezogen auf	effizient diff. Tbez=230°C
			ρ _{230°C} [J/m³]	[1/°C]
190	2071.06	0.38	478804565.7	0.000482233
200	2064.64	0.38	507911820.0	0.000609139
205	2061.43	0.38	524614304.9	0.000710601
210	2058.22	0.38	541512140.4	0.000862741
215	2055.01	0.38	558605326.7	0.001116237
220,5	2051.48	0.38	576771965.0	0.001703151
221	2051.16	0.38	578511563.0	0.00179207
222	1959.02	0.457	828717492.5	0.000117363
222,5	1958.68	0.457	830320588.2	0.000117376
223	1958.33	0.457	831923735.2	0.00011739
225	1956.95	0.457	838336836.6	0.000117445
230	1953.51	0.457	863132513.6	0.000117584
235	1950.06	0.457	902547776.1	0.000117722
240	1946.62	0.457	956608664.8	0.000117861
250	1939.72	0.457	1041616788	0.000118139

Tabelle 7-4: Werkstoffkennwerte PCM

Temperatur	E-Modul	Querkontraktionszahl		
[°C]	[MPa]	[-]		
123	5000	0.49		
220	5000	0.49		
221	10	0.49		
250	10	0.49		
Tabelle 7-5: Werkstoffkennwerte PCM				

· / · -5: Werkstoffkennwerte PCN

Bilinear Isotropic Hardening			
Temperatur	Fließgrenze	Tangentenmodul	
[°C]	[MPa]	[MPa]	
123	3	0.1	
220	3	0.1	
221	0.01	0.1	
250	0.01	0.1	

Tabelle 7-6: Werkstoffkennwerte PCM - Bilinear Isotropic Hardening

Gurson-Tvergaard-Needleman					
Temperatur	Anfangsfließgrenze	Anfangsporosität	Erste	Zweite	
[°C]	[MPa]	[-]	Konstante	Konstante	
			[-]	[-]	
123	3	0.01	1.5	1	
220	3	0.01	1.5	1	
221	0.1	0.01	1.5	1	
250	0.1	0.01	1.5	1	

Tabelle 7-7: Werkstoffkennwerte PCM – GTN

Gurson-Tvergaard-Needleman					
Temperatur [°C]	Dritte Konstante [-]	Lunkergröße [-]	Mittlere Dehnung [-]	Standardabweichung [-]	
123	2.25	0.001	10	1	
220	2.25	0.001	10	1	
221	2.25	0.008	0.01	1	
250	2.25	0.008	0.01	1	

Tabelle 7-8: Werkstoffkennwerte PCM - GTN

Gurson-Tvergaard-Needleman				
Temperatur [°C]	Kritische Porosität [-]	Versagensporosität [-]		
123	0.85	0.9		
220	0.85	0.9		
221	0.85	0.9		
250	0.85	0.9		

Tabelle 7-9: Werkstoffkennwerte PCM - GTN

Menetrey William						
Temperatur	Einachsige	Einachsige	Zweiachsige	Dilitanzwinkel		
[°C]	Druckfestigkeit	Zugfestigkeit	Druckfestigkeit	[°]		
	[MPa]	[MPa]	[MPa]			
123	20	3	24	10		
220	20	3	24	10		
221	0.1	0.01	0.11	10		
250	0.1	0.01	0.11	10		

Tabelle 7-10: Werkstoffkennwerte PCM - MW
- 7.2. Randbedingungen für die Analysen
- 7.2.1. Thermische Analyse Behälter 1:





Abbildung 7.1: Thermische Randbedingung für Behälter 1 – Temperatur [°C]









Behälter für Phasenwechselmaterial

Behälter 3:



Abbildung 7.3: Thermische Randbedingung für Behälter 3 - Temperatur [°C]

7.2.2. Mechanische Analyse Behälter 1:



Abbildung 7.4: Randbedingung für Gravitation [mm/s²] bei Behälter 1





Abbildung 7.5: Randbedingung für Umgebungsdruck [MPa] bei Behälter 1

Behälter 2:





Abbildung 7.6: Randbedingung für Gravitation [mm/s²] bei Behälter 2





Abbildung 7.7: Randbedingung für Umgebungsdruck [MPa] bei Behälter 2





Abbildung 7.8: Randbedingung für Gravitation [mm/s²] bei Behälter 3





Abbildung 7.9: Randbedingung für Umgebungsdruck [MPa] bei Behälter 3

7.3. Ergebnisse der Analysen 7.3.1. Thermische Analyse Behälter 1:



Abbildung 7.10: Verlauf der maximalen und minimalen Temperatur - Behälter 1 (axialsymmetrisch)



Abbildung 7.11: Verlauf der maximalen und minimalen Temperatur - Behälter 1 (Kuchenmodell)





Abbildung 7.12: Verlauf der maximalen und minimalen Temperatur - Behälter 2 (axialsymmetrisch)



Abbildung 7.13: Verlauf der maximalen und minimalen Temperatur - Behälter 2 (Kuchenmodell)





Abbildung 7.14: Verlauf der maximalen und minimalen Temperatur - Behälter 3 (axialsymmetrisch)



Abbildung 7.15: Verlauf der maximalen und minimalen Temperatur - Behälter 3 (Kuchenmodell)



7.3.2. Bilinear Isotropic Hardening Behälter 1 - axialsymmetrisch:

Abbildung 7.16: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - PCM des Behälters 1



Abbildung 7.17: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung – Mantel des Behälters 1











Abbildung 7.20: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen – Mantel des Behälters 1





Abbildung 7.21: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - PCM des Behälters 2

Behälter für Phasenwechselmaterial



Abbildung 7.22: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung – Mantel des Behälters 2



Abbildung 7.23: Verlauf der maximalen und minimalen hydrostatischen Spannung – PCM des Behälters 2



Abbildung 7.24: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen - PCM des Behälters 2



Abbildung 7.25: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen – Mantel des Behälters 2





Abbildung 7.26: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - PCM des Behälters 3







Abbildung 7.28: Verlauf der maximalen und minimalen hydrostatischen Spannung – PCM des Behälters 3



Abbildung 7.29: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung - PCM des Behälters 3





TU Bibliotheks Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Diplomarbeit ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar wien vourknowledge hub The approved original version of this thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.





Abbildung 7.31: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.32: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung – Mantel des Behälters 3







Abbildung 7.34: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.35: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung – Mantel des Behälters 3



Abbildung 7.36: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.37: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung – Mantel des Behälters 3



Abbildung 7.38: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung - PCM des Behälters 3









Abbildung 7.40: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - PCM des Behälters 1



Abbildung 7.41: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung – Mantel des Behälters 1







Abbildung 7.43: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung – Mantel des Behälters 1



Abbildung 7.44: Verlauf des maximalen und minimalen Lunkeranteils - PCM des Behälters 1



Abbildung 7.45: Verlauf der maximalen und minimalen hydrostatischen Spannung – PCM des Behälters 1





Abbildung 7.46: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - PCM des Behälters 2



Abbildung 7.47: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung – Mantel des Behälters 2







Abbildung 7.49: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung – Mantel des Behälters 2



Abbildung 7.50: Verlauf des maximalen und minimalen Lunkeranteils - PCM des Behälters 2



Abbildung 7.51: Verlauf der maximalen und minimalen hydrostatischen Spannung - PCM des Behälters 2





Abbildung 7.52: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - PCM des Behälters 3











Abbildung 7.55: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung – Mantel des Behälters 3













Abbildung 7.58: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - Mantel Behälters 1



Abbildung 7.59: Verlauf der maximalen und minimalen hydrostatischen Spannung - PCM des Behälters 1







Abbildung 7.61: Verlauf des maximalen und minimalen θ - PCM des Behälters 1



Abbildung 7.62: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen - PCM des Behälters 1



Abbildung 7.63: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen - Mantel des Behälters 1



Abbildung 7.64: Verlauf des maximalen und minimalen Lunkeranteils - PCM des Behälters 1





Abbildung 7.65: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung – Mantel des Behälters 2



Abbildung 7.66: Verlauf der maximalen und minimalen hydrostatischen Spannung - PCM des Behälters 2







Abbildung 7.68: Verlauf des maximalen und minimalen θ - PCM des Behälters 2



Abbildung 7.69: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen - PCM des Behälters 2



Abbildung 7.70: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen – Mantel des Behälters 2



Abbildung 7.71: Verlauf des maximalen und minimalen Lunkeranteils - PCM des Behälters 2





Abbildung 7.72: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung – Mantel des Behälters 3



Abbildung 7.73: Verlauf der maximalen und minimalen hydrostatischen Spannung - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.74: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.75: Verlauf des maximalen und minimalen θ - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.76: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.77: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannung – Mantel des Behälters 3



Abbildung 7.78: Verlauf des maximalen und minimalen Lunkeranteisl - PCM des Behälters 3



Behälter 3 - Kuchenmodell:

Abbildung 7.79: Verlauf der maximalen und minimalen Vergleichsspannung – Mantel des Behälters 3



Abbildung 7.80: Verlauf der maximalen und minimalen hydrostatischen Spannung - PCM des Behälters 3 Seite XLII







Abbildung 7.82: Verlauf des maximalen und minimalen θ - PCM des Behälters 3







Abbildung 7.84: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen – Mantel des Behälters 3



Abbildung 7.85: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.86: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen – Mantel des Behälters 3



Abbildung 7.87: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen - PCM des Behälters 3



Abbildung 7.88: Verlauf der maximalen und minimalen Schubspannungen – Mantel des Behälters 3



Abbildung 7.89: Verlauf des maximalen und minimalen Lunkeranteils - PCM des Behälters 3