

# MODELOS DE TURBULÊNCIA APLICADOS A ARMAZENAMENTO DE ENERGIA COM THERMOCLINE

## Victor Seram\*, Margarida Giestas\*\*

Laboratório Nacional de Energia e Geologia, Estrada Paço do Lumiar 22, Lisboa, Portugal\*\*\* <u>Victor.seram@lneg.pt; margarida.giestas@lneg.pt</u>

#### https://doi.org/10.34637/cies2020.1.2058

#### RESUMO

Neste trabalho são considerados os modelos de simulação em 2D de um tanque com *thermocline*, aplicando uma nova abordagem, considerando a modelação de várias camadas. Esta nova abordagem resulta das características de conceção do tanque que o tornam diferente dos usualmente utilizados. Após ter sido constatado que o modelo  $k-\epsilon$ , usualmente utilizado, se revelava inapropriado para descrever os fenómenos que ocorrem neste tanque, resolveu-se optar por um modelo de turbulência SST  $k - \omega$  mais sensível no caso de domínios complexos e malhas variáveis. Este modelo foi testado e comparado com novas hipóteses, nomeadamente a nível das fronteiras viabilizando quer o tempo computacional de resolução do problema quer a sua convergência e precisão. Três parâmetros estiveram sempre em consonância, o *time step*, a dimensão da malha e a velocidade inicial.

KEYWORDS: Modelação, modelo k $-\epsilon$ , modelo SST k $-\omega$ , comparação, convergência.

#### ABSTRACT

In this work, 2D simulation models of a thermocline tank are considered applying a new approach, considering the modeling of several layers, boundary contour and more complex mesh. This new approach results from the design characteristics of the tank that make it different from the ones usually used. Considering all these phenomena that occur in this tank, it was decided to opt for a more sensitive SST k -  $\omega$  turbulence model in the case of complex domains and variable meshes. This model was tested and compared with new hypotheses, namely at the boundaries, making possible both the computational time to solve the problem and its convergence and precision. Three parameters were always in mind, the time step, the mesh size and the initial speed of the velocity.

KEYWORDS: Modelling, k- $\epsilon$  model, SST k -  $\omega$  model, comparison, convergence.



### INTRODUÇÃO

O uso da dinâmica dos fluidos computacional (CFD) tem vindo a aumentar no que toca a simulação de escoamentos, com ou sem transferência de calor. Tal é consequência do avanço tecnológico e da *performance* computacional que tem uma elevada capacidade de armazenamento de dados. A utilização de modelos e métodos em simulação numérica é versátil podendo analisar inúmeros problemas da área da Engenharia. Os modelos numéricos têm como vantagem a possibilidade de resolver problemas complexos com diferentes condições de fronteira, apresentando resultados num curto intervalo de tempo.

Com a utilização da simulação numérica, tanto o tempo como o custo do projeto em causa pode ser reduzido. O objetivo do CFD é diminuir o número de testes e estudar problemas que não poderiam ser reproduzidos em laboratório. A utilização da simulação numérica computacional contribui fortemente para o desenvolvimento de uma etapa na Engenharia, desempenhando um papel decisivo nos custos, na qualidade dos projetos, e nas técnicas experimentais. (Maliska, C.R., 2004)

Para resolver as equações RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes) é necessário um modelo de turbulência. Os modelos de turbulência usualmente usados são o k– $\epsilon$  normalizado ou o modelo k– $\epsilon$  modificado (RNG). Quando ocorre uma separação no escoamento, o modelo k– $\epsilon$  modificado apresenta um melhor desempenho (Stephen Rice e Rhoads, 2008).

Outro modelo é o DNS (Direct Numerical Simulation). Contrariamente ao modelo RANS, o DNS resolve diretamente as equações de Navier-Stokes usando uma malha muito fina. Uma vez que exclui o cálculo da turbulência apenas podendo ser aplicado a geometrias simples (Zhiyin, 2015) sendo uma classe de modelos excluída para escoamentos turbulentos e geometrias complexas. Outra classe intermédia, mas que simula os efeitos turbulentos, consiste no modelo LES (Large Eddy Simulation; Zhiyin, 2015). Esta classe de modelos é mais precisa que a classe RANS e não tem tantas limitações relativas à geometria como as apresentadas pelo modelo DNS. O modelo LES também simula, com boa precisão, escoamentos com gradientes de pressão adversos (Constantinescu et al., 2007; Zhiyin, 2015).

Este trabalho apresenta apenas dois modelos de turbulência, suscetíveis de se aplicarem a um tanque de armazenamento *thermocline*, seguindo-se a comparação entre ambos.

A configuração geométrica do tanque em estudo apresenta algumas diferenças relativamente aos tanques usualmente referidos na literatura ((Rojas, 2013), (Yang et. al., 2011), (Flueckiger et.al.2010), tendo-se optado pela inovação de estudo da estratificação térmica a partir de oito camadas, (Stephanus E., Thomas F., 2018) e da conceção do processo de enchimento do tanque. De seguida apresenta-se o caso clássico de *thermocline* com um dos modelos e finaliza-se com alguns resultados do trabalho em curso (20180501 Fluent\_Case0 v1 (IR08) ondo foram testados os dois modelos, permitindo uma comparação entre os mesmos.

## MODELOS DE TURBULÊNCIA USADOS E SUA COMPARAÇÃO

#### MODELO STANDARD k-ε

O modelo padrão  $k - \varepsilon$  de transporte, recorre á energia cinética e á dissipação turbulenta  $\varepsilon$ . Dissipação turbulenta é a taxa na qual as flutuações de velocidade se dissipam. Neste modelo os coeficientes são derivados empiricamente; válido apenas para fluxos totalmente turbulentos. No modelo k-standard padrão, a viscosidade do redemoinho é determinada a partir de uma única escala de comprimento de turbulência, de modo que a difusão turbulenta calculada é aquela que ocorre apenas na escala especificada, enquanto que, na realidade, todas as escalas de movimento contribuem para a difusão turbulenta. Este modelo usa a hipótese de difusão em gradiente para relacionar as tensões de Reynolds com os gradientes de velocidade média e a viscosidade turbulenta. Apresenta mau desempenho para fluxos complexos que envolvem gradiente de pressão severa, separação e forte curvatura da corrente. A sua maior fraqueza reside na falta de sensibilidade a gradientes adversos de pressão e na falta de acutilância numérica junto das paredes.

#### MODELO k-ω

O modelo k- $\omega$  usa a hipótese de difusão em gradiente para relacionar as tensões de Reynolds com os gradientes de velocidade média e a viscosidade turbulenta. Resolve uma equação para energia cinética turbulenta k e uma segunda equação para a taxa de dissipação turbulenta específica (ou frequência turbulenta)  $\omega$ . Este modelo apresenta um desempenho melhor sob condições adversas de gradiente de pressão. Não emprega funções de amortecimento e possui condições simples de contorno de Dirichlet, o que implica vantagens significativas em estabilidade numérica. No entanto subestima a quantidade de separação para fluxos graves de gradiente de pressão adversa.

#### MODELO SST k-ω.

Modelo de aplicação da tensão de corte (*shear stress transport*) (SST) é uma variante do modelo padrão  $k - \omega$ . Combina o modelo original Wilcox k-  $\omega$ , quando se pretende fazer um estudo a nível das paredes de um reservatório (análise de camada limite). Em simultâneo o modelo padrão  $k - \varepsilon$  é usado longe de paredes, usando uma função de



mistura, e a formulação de viscosidade por redemoinho é modificada para levar em conta os efeitos de transporte da principal tensão de corte turbulenta (F. R. Menter, 1993); R. Menter, 1994)). Também limita a viscosidade turbulenta. As opções de transição e corte são fornecidas pelo padrão  $k - \omega$ .

### COMPARAÇÃO DOS MODELOS

O modelo SST k- $\omega$  (Shear-Stress Transport k- $\omega$ ) (Menter, F. R,1994) foi inicialmente proposto para a simulação de escoamentos aeronáuticos, onde existem altos gradientes adversos de pressão e separação de camada limite. No caso de escoamentos com camada limite, o modelo k- $\omega$  apresenta melhores resultados do que o modelo k- $\varepsilon$  na solução da região viscosa próxima da parede uma vez que exige uma condição de contorno não nula para  $\omega$  para correntes livres não turbulentas, e o escoamento calculado apresenta elevada sensibilidade ao valor especificado. O modelo SST k- $\omega$  sendo a conjugação dos modelos k- $\varepsilon$  e k- $\omega$  é um modelo robusto que utiliza o modelo k- $\varepsilon$  fora da camada limite e o modelo k- $\omega$  na região próxima das paredes. O modelo k- $\omega$  padrão e o modelo k- $\varepsilon$  modificado são multiplicados por uma função de mistura e somados. A função de mistura vale um (para o modelo k- $\omega$  padrão) na região interna da camada limite turbulenta e é igual a zero (para o modelo k- $\varepsilon$  padrão) na borda externa da camada. SST.

## MODELAÇÃO

## TANQUE THERMOCLINE COM DOMÍNIO SIMPLES

Um tanque de armazenamento térmico *,thermocline,* é preenchido com um meio poroso. Um fluxo de sal fundido (fase liquida) permite a transferência de energia dentro do tanque, ocupando todos os espaços existentes entre as partes porosas. Este sal fundido entra no tanque através da válvula de entrada superior. Após ocupar todos os vazios possíveis, sai pela válvula de saída no fundo do tanque. A maneira como o escoamento se processa é descrito através das equações de transporte de massa, transporte de momento e energia. A equação de momento em geral engloba a equação de massa através da aproximação de Boussinesq (Beckermann, 1988).

As equações de Navier-Stokes são consideradas como sendo o modelo próprio para descrever o escoamento. Contêm três grandes aproximações; a hipótese do continuo; a forma dos fluxos difusivos e a equação de estado. O modelo pode ser simplificado pela introdução de algumas considerações; tais como a de escoamento incompressível. Fica reduzido à conservação de massa e à conservação de momento.

Dois modelos foram considerados para a resolução do problema. Um para energia e outro para turbulência. Os modelos k- $\varepsilon$  são os modelos mais comuns usados em CFD para simular características de fluxos médios em condições de fluxo turbulento. Resolve duas equações que fornecem uma descrição geral da turbulência por meio de duas equações de transporte. A primeira variável transportada determina a energia na turbulência e é chamada energia cinética turbulenta (k). A segunda variável transportada é a dissipação turbulenta ( $\varepsilon$ ) que determina a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta.

O modelo Standard k- $\varepsilon$  proposto por (Launder et al.,1972), foi usado para resolver o problema de turbulência e enquadra-se na classe de modelos k- $\varepsilon$ .

O modelo de energia que leva em consideração o problema de mistura interna entre as fases sólida e líquida foi executado através de um modelo ANSYS acoplado.

As equações de transporte governantes foram resolvidas pelo método dos elementos de volume finito usando o software (ANSYS *Fluent*). O domínio computacional foi discretizado em volumes finitos, onde todas as variáveis conservadoras de fluxo de massa são armazenadas em cada centro quadrado da célula da malha (consultar ANSYS®17,18).

O método de inicialização escolhido foi o padrão e a solução calculada a partir da zona de entrada. O método da solução foi um algoritmo PISO associado a um esquema de velocidade de pressão.

Pressão, energia cinética turbulenta do momento e tempo foram discretizados por um esquema *upwind* de segunda ordem. A taxa de dissipação de turbulência foi discretizada por um esquema a *upw*ind de primeira ordem.

As iterações em cada etapa do tempo terminavam quando o resíduo adimensional para todas as equações apresentava um valor abaixo de 10-5 (convergência de precisão). A solução foi calculada com dupla precisão. A simulação executada foi feita numa máquina de sistema paralela com 32 GBytes de RAM e 4 processadores Intel-Xeon.

# CRITÉRIOS DE ESTABILIDADE DO MODELO

A malha considerada para solucionar o problema foi uma malha estruturada e teve em conta o número de Péclet (Fabrice, 2014) para evitar instabilidade numérica. A maioria dos métodos de simulação numérica como o Método dos Elementos Finitos (MEF) requer procedimentos de estabilização na modelação de problemas de transporte. Nestes problemas, podem ocorrer instabilidades numéricas ao se aproximar da solução, levando eventualmente á



existência de oscilações. O número de Péclet relaciona os efeitos convectivos e difusivos, juntamente com o tamanho do elemento da malha (Medina et al, 2007), através da expressão

 $Pe = \frac{||v||dm}{2\alpha}$  com v um vetor de velocidade convectiva genérico,  $\alpha$  um efeito genérico de difusibilidade e dm o tamanho do elemento da malha.

Pe> 1, podem ocorrer instabilidades numéricas, pois os efeitos convectivos dominam os difusivos; Pe << 1 é a difusão que domina o processo (o que não é o caso num *thermocline* com carga),

Recorre-se, pois ao número adimensional de Courant CFL. Este critério de estabilidade substitui o primeiro quando a malha do domínio é mais fina e o domínio mais complexo.

### TANQUE THERMOCLINE COM DOMÍNIO COMPLEXO

A Figura 1 mostra o domínio do problema atualmente em estudo com características diferentes do usual, dividido em camadas e onde a entrada e saída do fluido se processam de forma diferente. Esta inovação consiste na divisão da parte porosa em camadas, neste caso cinco e na forma como a entrada e saída do sal fundido entra e sai. Se a configuração das camadas do meio poroso não acarretam grandes problemas o mesmo não acontece com a entrada/saída do fluido de transferência térmico.



Fig.1 - Tanque de armazenamento térmico

A simulação deste problema implica um estudo pormenorizado a nível da malha uma vez que se colocam várias hipóteses. Esse estudo terá sempre em conta o custo computacional, o numero de Courant a precisão da convergência de uma simulação que se pretende que seja para um ciclo diário (carga e descarga). Aqui o *time step* será crucial. Antes de se avançar para transiente há que detetar a malha mais apropriada através de um estudo no estado estacionário.

O modelo de turbulência SST k-ω foi proposto neste problema específico pois leva em conta os efeitos da parede. A malha utilizada para este domínio mais complexo também é estruturada. Para a resolução adequada do problema considera-se o Número de Courant para evitar instabilidade numérica. O número de Courant (CFL) é o critério, em que o programa decide se as equações de fluxo e de calor são calculadas em cada célula. Governa a taxa de transferência de informações entre as células. De acordo com a expressão CFL:

$$CFL = \frac{U\Delta T}{\Delta x}$$

Onde U é a velocidade dentro do tanque,  $\Delta T$  é o passo de tempo e  $\Delta x$  é o tamanho mínimo da malha. A solução ideal ocorre quando o número de Courant é menor que 1. Este critério seleciona o tempo a ser adotado em relação à malha. Para tirar o melhor proveito dessa fórmula,  $\Delta T$  é escolhido, mantendo a restrição no número de Courant, uma vez que a razão mássica no interior do tanque é fixa.



# MÉTODO DE RESOLUÇÃO

As equações de transporte foram resolvidas de forma idêntica ao apresentado para o domínio simples. O método da solução foi um algoritmo PRESTO! associado a um *Pressure Based* esquema. Considera-se um resíduo para todas as variáveis abaixo de 10-3. O domínio de simulação aqui estudado foi discretizado para uma malha de 252.000 células. A malha obedece a certas propriedades relacionadas com o número de CFL Courant para ter estabilidade na integração. Assim, a malha deve ser testada e obedecer aos parâmetros de ortogonalidade, assimetria e proporção que indicam o que é uma boa malha. Esses parâmetros variam de domínio e, portanto, domínio 2D ou 3D, e podem ser analisados quando a malha é produzida.

# CASO ESTACIONÁRIO

Antes de se chegar á conclusão da malha apropriada para correr o programa em transiente houve necessidade de analisar o caso estacionário para várias malhas minimizando o custo computacional, testar o modelo para diferentes tipos de malhas tendo em conta as propriedades já apontadas.

Testaram-se dois modelos de turbulência: k- $\varepsilon$  e k- $\omega$  com o intuito de analisar a precisão dos resultados obtidos próximo das paredes, assim como o custo computacional. Dentro dos métodos disponíveis pelo ANSYS *Fluent* utiliza-se o SIMPLE e o SIMPLEC.

Uma malha estruturada semelhante com 252000 células é usada para ambos os modelos e testada com a mesma condição inicial durante a carga do tanque. Os valores dos resíduos obtidos constam da Tabela 1.

TT 1 1 1 1		/ 1		•. • •	1	· ·
Tabela I.	Valores d	e residuos	para os	criterios	de	convergencia:

			F	B	
Continuidade	Х	у	Energia	k	e/w
10e-3	10e-3	10e-3	10e-6	10e-3	10e-3

A comparação dos modelos apresenta-se de seguida:

### Tabela 2.a) Modelo k- $\epsilon$ b) Modelo k- $\omega$ (sst)



No estudo do caso estacionário fez-se um estudo exaustivo com malhas que podiam ir até 252000 células ou 1109160 células, analisando-se a de velocidade para o caso de 252000 células até 514755.

O número adimensional y+ aqui referido, é utilizado na teoria de camadas limites e traduz a distância à parede: Define-se neste contexto como sendo:



$$y^+ = \frac{u * y}{v}$$

Onde u é a velocidade de atrito, y a distância á parede e v a viscosidade cinemática local do escoamento. Esta abordagem faz sentido, pois é necessário cuidado com cada célula de todo o domínio. Os critérios em que as equações de fluxo e calor devem ser calculadas completamente em cada célula, independentemente das áreas sensíveis do tanque, fizeram uma grande mudança no resultado. O intervalo de tempo aceitável encontra-se no intervalo de 0,02 a 0,002 para um número de malha de 55000 (± 5000).

# CASO TRANSIENTE

A análise do problema transiente implica uma resolução com muito mais custo computacional e também aqui se comparam os modelos de resolução k- $\varepsilon$  e k- $\omega$  SST.



Fig 2- k-ε carga para 30mn b) k-ω carga para 30mn

A Figura.2 apresenta a simulação do enchimento do tanque após 30 minutos do instante t=0. Com o modelo SST k- $\omega$  a existência de um *thermocline* está perfeitamente delineada através da estratificação dentro do tanque (encarnado, pequena tira amarela e azul). Com o modelo k- $\varepsilon$  essa estratificação não ocorre.

O modelo k- $\omega$  SST utiliza uma função específica para lidar com a estabilidade. Esta função, dita inflação com a incorporação de casos transitórios, faz surgir um problema junto à parede, relacionado com a dimensão das células. Tal facto complica a malha no que toca a ser "conformal", ou seja a permitir continuidade entre células.



Fig. 3- Efeito na Parede

Como se vê na Figura 3 as células ao é da parede têm dimensões muito diferentes das células fora da camada limite. Este facto gera instabilidade na malha vindo um número de Courant superior a 1. Um compromisso pode ser alcançado com os valores de y +. Este número é responsável pela estabilidade perto das paredes. Embora a inflação seja removida, e y + não mostre muitos valores anormais, os valores considerados próximos das paredes podem ser tidos em consideração. Para superá-lo, a solução mais óbvia não é usar a inflação com o método, mas um tamanho menor de células na malha.



Wall	Y+ values		
Wall ullage	0		
Wall-Upper buffer	2.1228205		
Wall-filler 1	0.33850238		
Wall-filler 2	0.32479089		
Wall-filler 3	0.32617894		
Wall-filler 4	0.33034452		
Wall-filler 5	0.32531553		
Wall-Lower buffer	1.0193485		
Wall-bottom	1.9865817		
Net	0.80211629		

Tabela3-: y+ valores próximos da parede sem o efeito da inflação durante a carga do tanque.

O problema em estudo utiliza uma malha de 55000 células requer um passo de tempo da ordem dos 0,003, para garantir a convergência.

SST k-ω VS. MODELO k-ε.

O sistema em análise possuí domínios de fluxo de velocidade muito baixa e um fluxo de temperatura muito alta. O modelo k-ε (RNG) tem dificuldade em convergir e limita a convergência da equação de energia. O método SST k-ω resulta na convergência mais robusta e menor oscilação nos resíduos (Tabela. 2) Este modelo é recomendado para problemas que exigem uma alta precisão na sua simulação a nível das condições de fronteira.

No entanto, convergência não equivale a precisão. Não foram ainda correlacionados os resultados simulados para testar dados, portanto ainda não é possível verificar a sua precisão. Há contudo a prova na Figura 3 da existência clara de Thermocline com SST k-ω, o que não acontece com o outro método.

Atualmente, está a ser proposto um modelo envolvendo turbulência combinada e fluxo laminar (talvez 1% do domínio de fluido turbulento e o restante laminar) com convecção natural e difusão de espécies. No geral, a experiência com o modelo SST k- $\omega$  tem sido boa, mas é necessário reunir mais dados.

Quanto ao método da solução foi um algoritmo PISO associado a um esquema de velocidade de pressão. Os problemas decorrentes da discretização da pressão levaram á utilização do esquema PRESTO!

A escolha do *time ste*p é o fator decisivo da simulação, quanto á rapidez, dependendo do valor escolhido com um resultado confiável da solução. Portanto, o valor do intervalo de tempo precisa ser escolhido com testes e atenção específicos, pois o tempo de simulação depende do intervalo de tempo. E está diretamente ligado com o número de Courant.

# CONCLUSÃO

A utilização do modelo SST k- $\omega$  sem inflação na malha, mas com um compromisso no valor de y+ junto á parede do tanque permitiu obter uma convergência do problema.

O número células utilizado 55,000 contribuiu para que o time step se situasse num intervalo entre 0,02 a 0,002 para uma simulação de carga e descarga ao longo de um dia. A precisão foi a necessária para se avaliarem vários parâmetros relativos ao desenvolver de todo o processo.

Durante vários anos a modelação dos tanques de armazenamento era feita utilizando o modelo k-ε. O domínio apresentava uma malha estruturada com mais ou menos células, agora quando se pretende conhecer a evolução da temperatura nas paredes e o domínio é estratificado por camadas há que repensar o modelo a utilizar e o efeito a que simulação se destina bem como o tempo real que dispõe para o fazer.

O fator que considera a parede implica que a simulação seja feita de forma diferente. Os valores de y +, juntamente com o modelo de turbulência, são considerados significativos. A formação de um *thermocline* é um resultado importante podendo concluir-se sobre a importância do modelo de turbulência SST k- $\omega$  aplicado ao armazenamento de energia com thermocline em situação de estratificação térmica. Nesta situação o modelo k- $\varepsilon$  não se mostrou apropriado.

#### AGRADECIMENTOS

Agradece-se a cooperação proporcionada pelo Projecto NewSOL onde se integram os estudos realizados.

## REFERÊNCIAS

Artigos em Revista



Beckermann C. and Viskanta R.1988. Natural convection solid/liquid phase change in porous media. Int. J. Heat Mass Trans.Vol.31. pp. 35-46.

Constantinescu, G. S., Krajewski, W. F., Ozdemir, C. E. e Tokyay, T. (2007). "Simulation of airflow around rain gauges: Comparison of LES with RANS models". Advances in Water Resources 30.1, pp. 43–58.

Fabrice S. 2014. Understanding Stabilization Methods, COMSOL, May.

Flueckiger S. and Garimela S.V. 2011.Second Law Analysis of Molten-Salt Thermal Energy Storage in Thermoclines. Sol. Energy. Vol. 86.

Menter, F. R. Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. AIAA Jounal, Vol. 32, No. 8, pp. 1598-1605, 1994

Bayon R. and Esther Rojas E.2013. Simulation of thermocline storage for solar thermal power plants: From dimensionless results to prototypes and real-size tank. Int. J. Heat Mass Trans. Vol. 60.

Yang Y. and Garimella S.V. 2010. Molten-Salt Thermal Energy Storage in Thermoclines under Different Environmental Boundary Conditions. Appl. Energ. Vol. 87.

Zhiyin, Y. (2015). "Large-eddy simulation: Past, present and the future". Chinese Journal of Aeronautics 28.1, pp. 11–24.

### Artigos em Actas de Congressos

Medina A.R.and Revilla I.H. 2007. El numéro de Péclet y su signification en la modelación de transporte difusivo decontaminantes. IV Congreso Internacional, II Congreso Nacional de Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Editores © UMSNH– SMMNI - CIMNE, México.

### Relatórios de Projectos

Stephanus E., Thomas F., (2018). NewSOL thermocline first chosen design, Rev 2, H2020 Grant Agreement Number.:720985, Project NewSOL

#### Livros

Launder B.E and Spalding D.B. 1972. Lectures in mathematical models of turbulence. Fourth Academic Press, London, England.

Maliska, C.R., 2004, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional". Ed. LCT.