

Simuliranje kondenzacije u bateriji

Klara Pešić, Mentori: mag.ing.mech. Sandor Eichinger, doc. dr. sc. Andrej Novak

Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Bijenička 32, Zagreb

22. siječnja 2023.

Sažetak

U ovom radu proučena su dva modela kondenzacije u CFD programu Star-CCM+: Fluid Film i Volume of Fluid. Napravljen je pokušaj validacije ovih modela koristeći podatke eksperimenta COSMEA, no korištenjem Fluid Film modela nisu reproducirane eksperimentalne vrijednosti. VOF model uspješno je reproducirao eksperimentalne vrijednosti međutim potrebno je napraviti još simulacija prije nego je moguće tvrditi da je model validiran. Fluid Film model primjenjen je u simulaciji baterije te je postignuta kondenzacija.

1 Uvod

Jedan od najvećih izazova prilikom dizajniranja baterijskih sustava za vozila je osigurati izdržljivost i dugotrajnost komponenti. U bateriji se tijekom radnog ciklusa stvara toplina koja može oštetiti komponente i skratiti životni vijek baterije. Kako bi se to izbjeglo, u baterije se ugrađuje sustav za hlađenje. Međutim, pri određenim uvjetima, kao što su visoka vlažnost zraka, može doći do kondenzacije vode u bateriji, a time i kvara na sustavu. Do optimalnog dizajna baterijskog sustava može se doći testiranjem koncepata u laboratoriju ili simulacijama, koristeći programe iz područja računalne dinamike fluida (eng. *Computational Fluid Dynamics* ili CFD). Simulacije zahtijevaju manje resursa te u kratkom vremenu omogućuju provjeru većeg broja različitih koncepata. U ovom seminaru napravljen je pokušaj validacije dva modela kondenzacije, te je jedan od njih primjenjen na odabrani model baterije.

2 Modeli

Jedan od trenutno najraširanijih i najpoznatijih CFD programa je Star-CCM+. On sadrži nekoliko modela pomoću kojih se može simulirati kondenzacija, a u

ovom seminaru fokus je na dva: Fluid Film i Volume of Fluid (skraćeno VOF). Oba modela su Eulerska, što znaci da u fiksnoj točki promatraju promjenu svojstava fluida koji kroz nju prolazi. Fluid Film model koristi se za simuliranje kondenzacije na zidovima. On rješava jednadžbe kontinuiteta za masu, moment i volumni udio faza za prvi sloj ćelija koje sadrže sloj tekućine i nalaze se direktno uz zid. [5] Budući da nije potrebno napraviti detaljnu diskretizaciju domene u području granice između faza, ovaj model štedi vrijeme i računalne resurse. Volume of Fluid model je numerički model koji prati oblik i poziciju granice između dvije faze. Raspodjela i-te faze definirana je volumnim udjelom: $\alpha_i = \frac{V_i}{V}$, gdje je V_i volumen i-te faze u ćeliji a V ukupni volumen ćelije. Model rješava jednu dodatnu jednadžbu koja opisuje transport volumnog udjela α_i :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \alpha_i dV + \int_A \alpha_i \mathbf{v} \cdot \mathbf{dA} = \int_V S_{\alpha,i} dV \quad (1)$$

gdje je $S_{\alpha,i}$ izvor ili ponor volumnog udjela i-te faze. [5] U slučaju kada postoje dvije VOF faze, model rješava jednadžbu očuvanja mase samo za jednu fazu. Volumni udio druge faze je zatim određen tako da u je u svakoj ćeliji suma volumnih udjela jednaka 1. Ovaj model zahtjeva detaljnu diskretizaciju domene

u području granice.

Oba modela rješavaju iste jednačbe za kondenzaciju. Na granici između sloja i okolnog fluida vrijedi:

$$\mathbf{v}_f|_{granica} = \mathbf{v}|_{granica}$$

$$(\mathbf{T}_f \cdot \mathbf{dA} + p_f \mathbf{dA})|_{granica} = (\mathbf{T} \cdot \mathbf{dA} + p \mathbf{dA})|_{granica} \quad (2)$$

gdje je v brzina, p tlak, a \mathbf{T} viskozni stres tenzor. Veličine označene sa indeksom f odnose se na veličine u sloju kondenzirane tekućine. Okolni fluid, kao i sloj kondenzirane tekućine, može sadržavati više različitih komponenti. Tok mase za svaku komponentu je očuvan na granici između sloja i okolnog fluida, tj. vrijedi:

$$\rho Y_i (v_n - \dot{h}) - \rho D_i \frac{Y_i}{dx} = \rho_f Y_{f,i} (v_{f,n} - \dot{h}) - \rho_f D_{f,i} \frac{Y_i}{dx} \Big|_f \quad (3)$$

gdje je ρ gustoća okolnog fluida, Y_i maseni udio i -te komponente fluida, x koordinata okomita na granicu, v_n komponenta brzine fluida okomita na granicu, D_i koeficijent molekularne difuzije za i -tu komponentu fluida te \dot{h} brzina promjene debljine sloja. Ukupni tok mase je također očuvan:

$$\rho(v - \dot{h}) = \rho_f(v_f - \dot{h}) \quad (4)$$

Za v_f možemo uzeti da je jednak 0. Kombiniranjem prethodne dvije jednačbe te sumiranjem po komponentama kondenziranog sloja N_f dobivamo:

$$(1 - \sum_{j=1}^N Y_j) \dot{m} = \sum_{j=1}^N \rho D_j \frac{dY_j}{dx} \quad (5)$$

gdje $\dot{m} = \rho_f \dot{h}$ ukupna brzina kondenzacije. Ukupna brzina kondenzacije je tada jednaka:

$$\dot{m} = \frac{\sum_{j=1}^N \rho D_j \frac{dY_j}{dx}}{(1 - \sum_{j=1}^N Y_j)} \quad (6)$$

Za pojedinačne komponente vrijedi:

$$\dot{m}_i = Y_i \dot{m} - \rho D_i \frac{dY_i}{dy} \quad (7)$$

Maseni udjeli komponenti na granici Y_i odrede se pomoću Raoultovog zakona. Očuvanje toka topline na granici izraženo je jednačbom:

$$k \frac{dT}{dx} - k_f \frac{dT}{dx} \Big|_f - \dot{Q} = 0 \quad (8)$$

gdje je k termalna vodljivost, i vrijedi:

$$\dot{Q} = \sum_{i=1}^N \Delta H_i^{para} \dot{m}_i \quad (9)$$

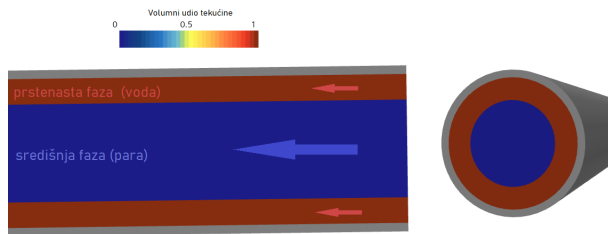
Kombiniranjem jednačbi 7 i 9 dobiva se finalni izraz za ukupnu brzinu kondenzacije:

$$\dot{m} = \frac{\dot{Q} + \sum_{i=1}^N \Delta H_i^{para} \rho D_i \frac{dY_i}{dx}}{\sum_{i=1}^N \Delta H_i^{para} Y_i} \quad (10)$$

Model iterativno traži temperaturu T_s za koju vrijedi jednačba 8 koristeći metodu sekante. Jednom kada pronade T_s , iz jednačbe očuvanja toka topline 8 odredi \dot{Q} , zatim koristeći 10 izračuna \dot{m} i konačno pomoću jednačbe 7 odredi \dot{m}_i . [1]

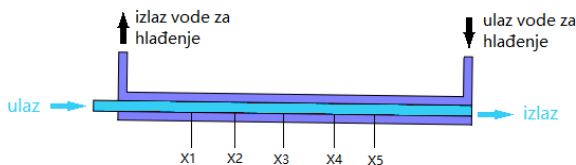
3 Eksperimentalni podatci i postavke simulacija

Za validaciju modela kondenzacije korišteni su podatci projekta COSMEA.[7] U tom projektu proučena je kondenzacija u cijevi duljine 3070 mm, promjera 43.3 mm sa stijenkom debljine 2.5 mm koja je nagnuta u odnosu na horizontalu za -0.76° . Shema postava prikazana je na slici 2. Postavke 23 provedena eksperimenta i geometrija cijevi određeni su na temelju studija KERENA sustava hitnih kondenzatora za nuklearne reaktore. U eksperimentima 51, 151, 251, 451 i 651 u cijev ulazi vodena para, dok u ostalim eksperimentima u cijev ulazi mješavina vode i pare u prstenastoj konfiguraciji kao što je prikazano na slici 1. Postavke eksperimenta prikazane su na slici 3 a pripadna fizikalna i kemijska svojstva vode i pare na slici 1. Za validaciju Fluid Film modela mogu se koristiti eksperimenti kod kojih u cijev ulazi samo para, dok se za validaciju VOF modela mogu koristiti samo eksperimenti sa mješavinom vode i pare (inicijalno mora postojati granica između dvije faze).



Slika 1: Shema prstenaste konfiguracije

Budući da je debljina sloja kondenzirane vode na dnu cijevi važan podatak za usporedbu eksperimenata i simulacija, za validaciju Fluid Film modela prioritet imaju eksperimenti 51 i 651.



Slika 2: Shema eksperimentalnog postava za projekt COSMEA sa oznacnim pozicijama mjernih točaka: X1, X2, X3, X4 i X5, koje su od ulaza udaljene za: 470 mm, 870 mm, 1320 mm, 1800 mm i 2170 mm

4 Fluid Film - postavke simulacija i rezultati

Na temelju podataka iz studije [6] napravljena su dva 3D modela cijevi: jedan bez čelične stijenke debljine 2.5 mm i jedan sa stijenkom. Za modeliranje turbulencije odabrani su RANS i $k-\epsilon$ modeli te su inicijalne vrijednosti izračunate za svaki eksperiment pomoću online alata: "Turbulence Calculator". [3]. Za dobru konvergenciju i preciznost rezultata potrebno je napraviti prikladnu diskretizaciju domene, tj. generirati prikladnu mrežu. Preciznost mreže povećana je uz stijenku cijevi te, u slučaju VOF simulacija, na granici između vode i pare. Debljina prvog sloja mreže uz stijenku izračunata je pomoću online alata: "y+

calculator". [8] Tri primjerka korištenih mreža prikazana su na slici 4. U simulacijama je uključeno djelovanje gravitacije. Kondenzacija je tranzijentan proces, pa je vremenska diskretizacija obavljena pomoću Implicit Unsteady modela. Za odabir prikladnog vremenskog koraka koristen je Courant–Friedrichs–Lewy uvjet uz $Co < 1$, gdje je Co Courant-ov broj. U simulacijama je bilo potrebno odabrati prikladnu jednadžbu za računanje tlaka zasićene vodene pare. Uz zadanu, polinomnu jednadžbu odabrana je Antoineova jednadžba, a koeficijenti su određeni iz istraživanja Liu et al. [2]. U simulacijama `sim_51_heat_extend` i `sim_51.3` i `sim_51.4` uključena je i stijenka cijevi. Temperatura rashladne tekućine inicijalizirana je na vanjskoj strani stijenke, te je omogućena kondukcija topline između cijevi i pare. Simulacije sa Fluid Film modelom zahtijevaju uvođenje i jedne inertne plinovite faze koja ne sudjeluje u kondenzaciji, no volumni udio te faze je postavljen na minimalnu vrijednost od 0.1% pa je očekivani utjecaj na konačne rezultate jako mali. U slučaju da kondenzacija nije uspostavljena zbog suhog zida cijevi, debljina sloja kondenzirane vode je inicijalizirana na vrijednost od $1 \cdot 10^{-4}$ mm. Konvergencija simulacija je utvrđena promatranjem reziduala, prosječnog toka mase na ulazu i izlazu iz cijevi, raspodjele temperature i brzine na presjecima cijevi. U simulacijama su isprobane različite postavke: laminaran i turbulentan tok u cijevi, različite jednadžbe za računanje tlaka zasićene vodene pare, modeli sa i bez stijenke cijevi, mreže sa većim i manjim brojem slojeva uz zid.

U svim simulacijama nakon 3 s prestaje rast sloja kondenzirane vode te se, kao i u eksperimentu, uspostavlja stacionarno stanje. Rezultati simulacija se mogu vidjeti u tablicama 1 i 2.

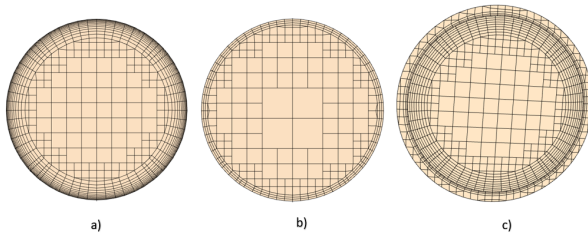
Iz tablica možemo vidjeti da korištenjem Fluid Film modela nisu reproducirane eksperimentalne vrijednosti. Visine sloja kondenzirane vode su općenito unutar reda veličine eksperimentalnih vrijednosti. Tok mase kondenzirane vode odstupa značajno više.

No.	P_{in}	$T_s[P_{in}]$	\dot{m}_s	T_s^{in}	\dot{m}_w	T_w^{in}	h_{X1}	h_{X2}	h_{X3}	h_{X4}	h_{X5}	P_{out}	\dot{m}_{cond}	P_{T4-O1}	v_s	v_w
No.	(MPa)	(K)	(kg/s)	(K)	(kg/s)	(K)	(mm)	(mm)	(mm)	(mm)	(mm)	(MPa)	(g/s)	(kW)	(m/s)	(m/s)
51	0.506	425.35	0.087	425.2	-	-	ns	ns	2.5	3.5	4.0	0.500	62	57	21.93	0
52	0.504	425.25	0.064	425.1	0.041	424.7	ns	4.5	4.5	4.0	5.5	0.500	47	50.5	16.91	0.66
151	1.520	472.07	0.256	471.8	-	-	ns	ns	ns	ns	ns	1.500	129	99	22.75	0
152	1.514	471.88	0.206	471.7	0.050	467.4	ns	3.0	4.0	4.0	5.0	1.500	114	92.5	19.18	0.85
153	1.510	471.76	0.152	471.6	0.102	471.0	4.5	4.5	5.0	5.0	5.5	1.500	101	87	14.15	1.75
154	1.512	471.82	0.103	471.6	0.151	471.6	6.0	5.5	6.5	7.0	8.0	1.505	82	79	9.59	2.59
251	2.536	497.86	0.406	497.6	-	-	ns	ns	2.0	ns	ns	2.500	156	107	22.91	0
252	2.531	497.76	0.334	497.5	0.072	493.6	ns	1.5	2.5	4.5	5.0	2.501	148	103.5	18.85	1.28
253	2.523	497.59	0.270	497.4	0.138	496.8	3.0	4.0	5.0	5.0	5.5	2.500	132	98	15.23	2.45
254	2.517	497.46	0.195	497.3	0.209	497.2	5.0	5.0	5.5	6.5	7.0	2.502	112	90	11.00	3.72
255	2.519	497.50	0.124	497.4	0.272	497.8	5.5	6.5	7.5	8.5	9.5	2.508	87	83	6.99	4.84
451	4.545	531.19	0.605	530.9	-	-	ns	1.5	ns	1.5	ns	4.500	230	135.5	17.93	0
452	4.544	531.18	0.523	530.9	0.091	526.1	ns	2.0	2.5	3.5	4.0	4.503	211	130.5	16.24	1.72
453	4.536	531.07	0.428	530.8	0.180	529.6	2.5	3.0	3.5	4.5	5.5	4.505	191	127.5	13.29	3.40
454	4.536	531.07	0.342	530.8	0.266	530.6	2.5	4.0	4.5	5.5	6.5	4.513	175	121.5	10.62	5.02
455	4.546	531.21	0.250	531.0	0.356	531.5	5.5	5.5	6.5	8.0	9.5	4.530	142	112.5	7.76	6.73
456	4.538	531.10	0.202	530.9	0.398	531.7	4.5	6.0	7.0	7.5	9.5	4.523	116	106.5	6.27	7.52
651	6.565	554.67	0.801	554.4	-	-	ns	1.5	ns	2.5	1.5	6.503	292	157	16.06	0
652	6.548	554.49	0.684	554.3	0.117	549.9	1.5	2.0	3.0	4.0	4.0	6.494	268	153.5	14.37	2.32
653	6.544	554.45	0.568	554.2	0.238	552.7	2.5	3.5	4.0	4.5	5.0	6.504	249	151	11.93	4.73
654	6.516	554.17	0.434	554.0	0.360	553.8	3.5	3.5	5.0	6.5	7.5	6.484	226	145	9.11	7.15
655	6.535	554.36	0.343	554.1	0.462	554.5	5.0	5.0	6.5	7.5	9.5	6.508	185	137.5	7.20	9.18
656	6.574	554.76	0.247	554.5	0.559	555.1	6.0	8.0	10.0	12.0	13.5	6.549	130	126.5	5.18	11.11

Slika 3: Postavke i rezultati 23 eksperimenta provedena u okviru COSMEA studije, preuzeto iz [6], P^{in} je tlak na ulazu u cijev, P^{out} je tlak na izlazu iz cijevi, T_s i T_w su temperature pare i vode na ulazu u cijev, \dot{m}_v je tok mase pare, a \dot{m}_w je tok mase vode na ulazu u cijev.

	\dot{m}^{in}	\dot{m}^{out}	\dot{m}^{cond}	h_{X1}	h_{X2}	h_{X3}	h_{X4}	h_{X5}
	($kg s^{-1}$)	($kg s^{-1}$)	($kg s^{-1}$)	(mm)	(mm)	(mm)	(mm)	(mm)
Eksperiment 651	0.801	-	0.292	.	1.5	.	2.5	1.5
sim_651_1	0.80	0.57	0.23	2.2	3.6	5.3	6.5	7.4
sim_651_2	0.80	0.37	0.43	2.9	10.2	9.5	10.9	12.4

Tablica 1: Usporedba eksperimentalnih vrijednosti i rezultata simulacija za eksperiment 651



Slika 4: Mreže korištene u simulacijama: a)sim_651_2, b)sim_51, c)sim_51_4

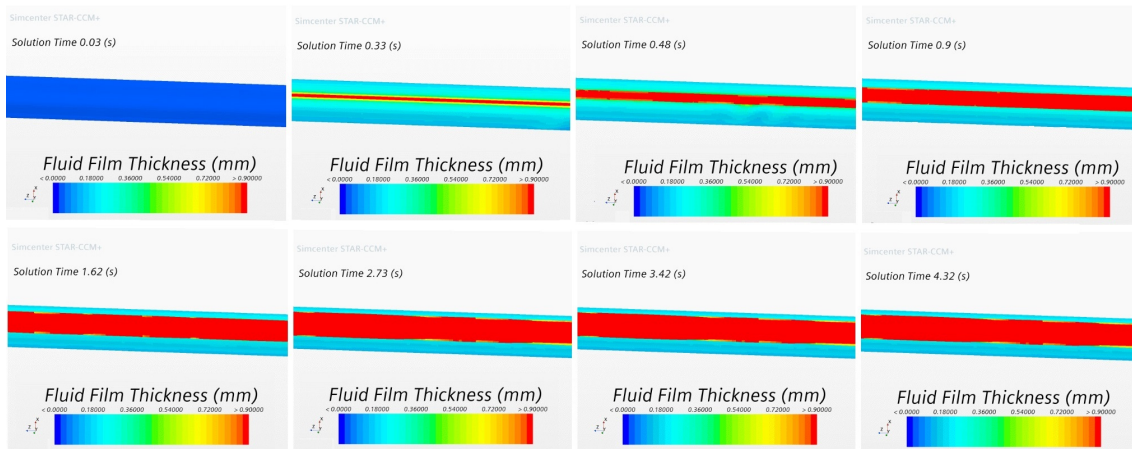
5 Volume of Fluid - postavke simulacija i rezultati

Mreže generirane za validaciju VOF modela prikazane su na slici 6.

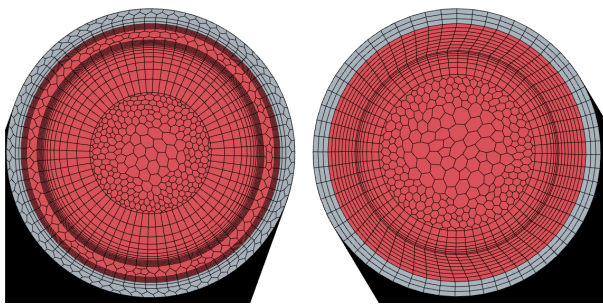
U svim VOF simulacijama je uključena stijenka cijevi. Koeficijenti turbulencije, vremenski korak i ostale postavke su određene na isti način kao i za Fluid Film model. Jedina simulacija koja je konvergirala unutar vremenskog okvira ovog istraživanja bila je simulacija eksperimenta 653 i rezultati su prikazani na slici 7 i u tablici 3. U tablici možemo vidjeti da je VOF model dao tok mase kondenzirane vode i razine stupca kondenzirane vode približno jednake eksperimentalnima. Potrebno je napraviti još simulacija različitih eksperimenata koristeći ovaj model kako bismo mogli sa sigurnošću tvrditi da ovaj model daje rezultate bliske eksperimentalnima.

	\dot{m}^{in} ($kg s^{-1}$)	\dot{m}^{out} ($kg s^{-1}$)	\dot{m}^{cond} ($kg s^{-1}$)	h_{X1} (mm)	h_{X2} (mm)	h_{X3} (mm)	h_{X4} (mm)	h_{X5} (mm)
Eksperiment 51	0.087	-	0.062	.	.	2.5	3.5	4
sim_51_1	0.088	0.055	0.033	1.8	2.2	3.3	3.8	4.6
sim_51_2	0.088	0.024	0.064	3.3	4.7	5.34	6.2	6.5
sim_51_heat_extend	0.088	0.088	0.0002	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2
sim_51_3	0.088	0.089	0.001	1.2	1.2	1.2	1.2	1.5
sim_51_4	0.088	0.089	0.001	1.5	1.6	1.6	1.6	1.5

Tablica 2: Usporedba eksperimentalnih vrijednosti i rezultata simulacija za eksperiment 51



Slika 5: Volumni udio tekućine u cijevi tijekom različitih vremenskih trenutaka za simulaciju sim_651. Pogled na cijev odozdo.



Slika 6: Dvije mreže koristene u VOF simulacijama

6 Primjena na modelu baterije

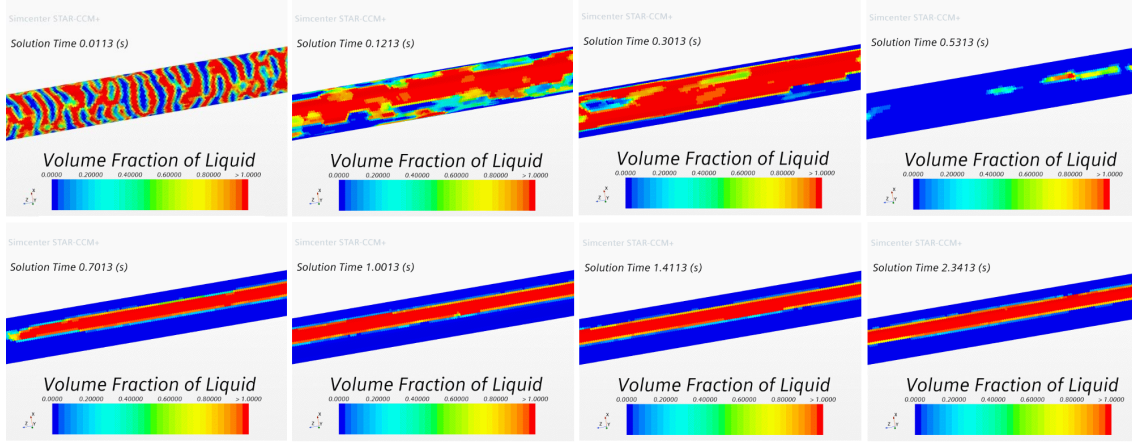
6.1 Model i postavke simulacija

Za simulaciju baterije korišten je općeniti model baterije prikazan na slici 10. Početni uvjeti simulacija 5

određeni su na temelju eksperimentalnih podataka istraživanja Kim et al. [4] Budući da inicijalno ne postoji granica između plinovite i tekuće faze, nije moguće koristiti VOF model. Za simulacije baterija često je dovoljna samo informacija hoće li doći do kondenzacije ili ne, stoga je odabran Fluid Film model. Za svaku komponentu baterije je definiran materijal od kojeg je napravljena te je omogućena kondukcija topline među svim komponentama. Ovakav model zahtijeva finu mrežu i jako mali vremenski korak. Radi lakšeg prijelaza sa cijevi na model baterije, simuliran je prvo samo sustav za hlađenje. Na slici 8 možemo vidjeti da je kondenzacijom nastao jako tanak sloj vode na modelu. U drugom pokušaju, simulirana je cijela baterija i kondenzacija je (radi jednostavnosti) omogućena ponovno samo na sustavu za

	\dot{m}^{in} ($kg s^{-1}$)	\dot{m}_{ukupno}^{out} ($kg s^{-1}$)	\dot{m}^{cond} ($kg s^{-1}$)	h_{X1} (mm)	h_{X2} (mm)	h_{X3} (mm)	h_{X4} (mm)	h_{X5} (mm)
Eks. 653	para:0.568, voda:0.238	-	0.249	2.5	3.5	4	4.5	5
sim_653_1	para:0.569, voda:0.239	1.05	0.24	2.2	2.7	2.7	3.7	4.4

Tablica 3: Usporedba eksperimentalnih vrijednosti i rezultata simulacija za eksperiment 653



Slika 7: Volumni udio tekućine u cijevi tijekom različitih vremenskih trenutaka za simulaciju sim_653. Pogled na cijev odozdo.

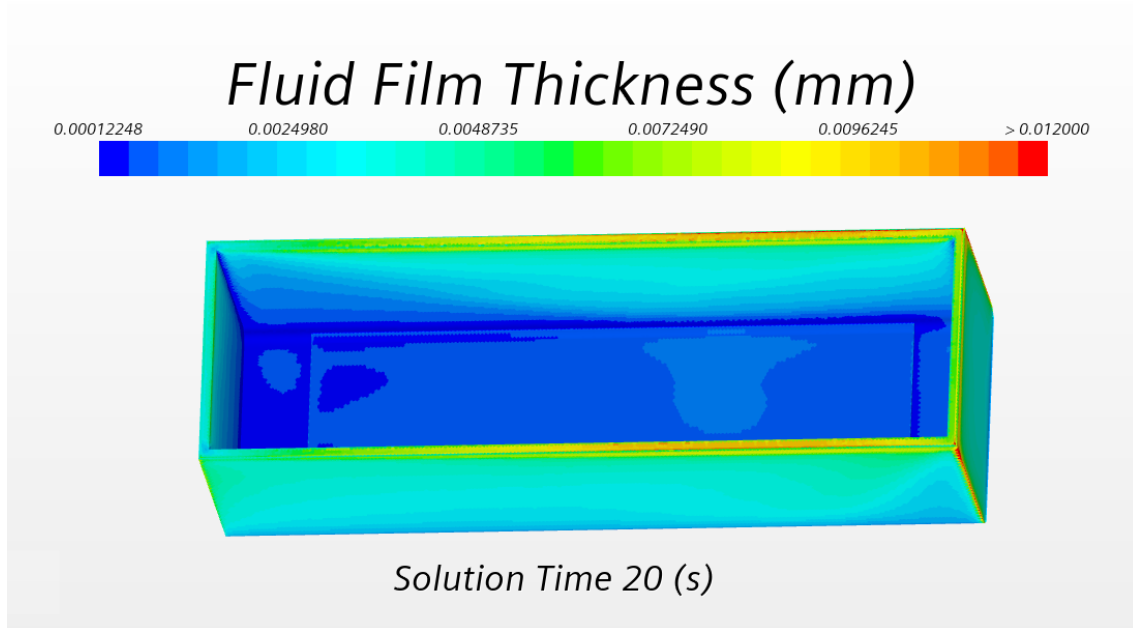
hlađenje. Zbog malog vremenskog koraka, simulacija je trajala samo 1.5 sekundi i kondenzacijom je nastao izrazito tanak sloj vode. Fokus daljnjeg istraživanja biti će povećanje vremenskog koraka i broja komponenti na kojima može doći do kondenzacije.

7 Zaključak

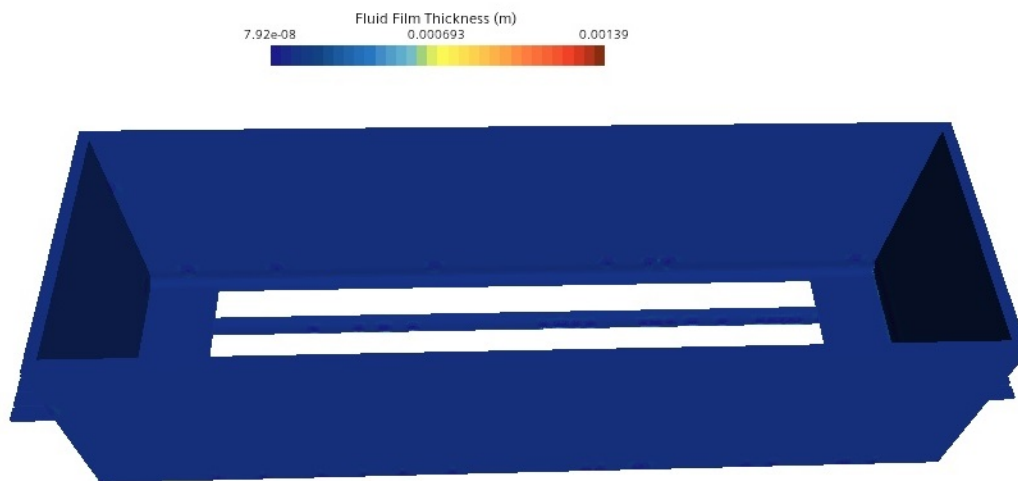
Fluid Film model možemo koristiti da bismo odredili hoće li doći do kondenzacije, te za općenito promatranje ponašanja sustava, međutim ne možemo dobiti precizne informacije o količini tekućine koja će se kondenzirati. Volume of Fluid model daje mnogo bolje rezultate, no potrebno je napraviti još simulacija različitih eksperimenata prije nego možemo sa sigurnošću tvrditi da ovaj model daje rezultate bliske eksperimentalnima.

Literatura

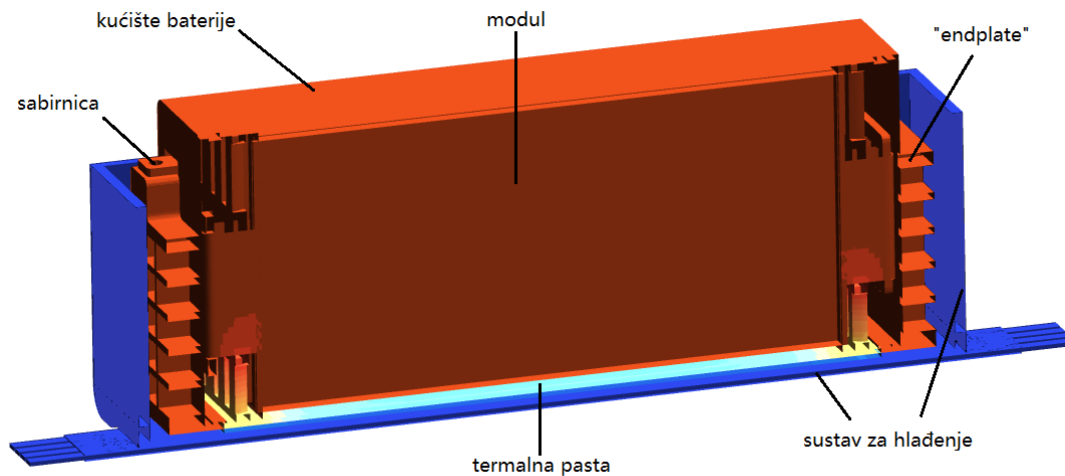
- [1] *Simcenter STAR-CCM+® Documentation*. Siemens Product Lifecycle Management Software Inc., 2018.
- [2] W.T.Jr. Lindsay C. Liu. Vapor pressure of deuterated water from 106 to 300.deg. *Journal of Chemical Engineering Data*, 15(4):510, 1970.
- [3] iChrome. Turbulence calculator. <http://ichrome.com/blogs/archives/342>, Jul 2016. Accessed from November 2022 to January 2023.
- [4] F.; Kotak B.; Knudsen P.V.R.; Girgsdies U.; Schweiger H.-G. Kim, W.-K.; Steger. Water condensation in traction battery systems. *Energies*, 12(6):1171, 2019.
- [5] N. Sinha, M.A. Sitek, and S.A. Lottes. Modeling of water film formation on a stay-cable. Techni-



Slika 8: Debljina sloja kondenzirane tekućine na modelu sustava za hlađenje nakon 20s



Slika 9: Debljina sloja kondenzirane tekućine na modelu baterije nakon 1.5s



Slika 10: Presjek modela baterije korišten u simulaciji sa označenim najvažnijim komponentama

cal Report ANL-19/26,, Argonne National Laboratory, Aug 2019. .,

- [6] Rita Szijártó. Condensation of steam in horizontal pipes - model development and validation. 2015.
- [7] U. Hampel C. Vallée T. Geißler, M. Beyer and H. Pietruske. Single effect studies of steam condensation and heat transfer in a declined pipe. *Technical Report Final Report*, 2012.
- [8] Volupe. y+ calculator. <http://example.com>. Accessed from November 2022 to January 2023.