

氢泄漏稳定扩散场数值模拟与回归建模研究^①秦国军^{②*} 袁杰红^{**} 胡葛庆^{*} 顾环云^{*} 余 照^{**}

(* 国防科学技术大学机电工程与自动化学院 长沙 410073)

(** 国防科学技术大学指挥军官基础教育学院 长沙 410003)

摘 要 研究了室外无风环境下高压储氢容器泄漏稳定扩散问题。首先应用组分传输模型以及计算流体力学软件 FULENT 的 Realizable 湍动能-耗散率($k-\epsilon$)模型对泄漏扩散过程进行模拟和数值仿真,得出了泄漏口附近稳定扩散对称面氢气浓度分布图。在此基础上,对仿真获得的扩散浓度数据,采用依次针对射流方向和射流垂直方向进行回归分析的方法,建立了 10MPa 压力储氢容器漏孔直径为 1mm 时泄漏稳定扩散场的参数模型。结果表明,数值模拟计算与理论预测的流场基本吻合,而稳定扩散场的参数模型反映了数值仿真结果,并具有一定的推广能力。

关键词 高压氢泄漏,扩散仿真,参数模型,回归分析,室外无风环境

0 引言

氢是最重要的航天推进剂之一,也是一种目前受到广泛关注的清洁能源。随着载人航天技术及氢经济的快速发展,人们对氢安全的要求越来越高。快速判断氢气泄漏的位置及泄漏氢气在空间的分布状况是氢安全检测的重点,因此,迫切需要建立裂纹存在情况下储氢容器泄漏扩散的浓度场模型。为此,2000 年美国迈阿密大学 Swain 等通过 He 产生泄漏原始数据,采用计算流体力学方法对密闭空间、半封闭空间和开放空间中的氢泄漏进行了预测^[1,2]。2003 年加州大学洛杉矶分校 Lee 等研究了特定尺寸圆形和椭圆槽形微孔情况下氢和氦的泄漏率关系^[3]。Schefer 等利用氦气与氢气物理性质相近的特点,用氦气代替氢气,讨论了氢气在有通风口的密闭空间内泄漏扩散流场的特点^[4]。但这些研究大都是应用数值仿真方法对扩散过程进行定性分析,而对扩散浓度场数学建模的研究相对较少。

本文应用组分输运方程以及计算流体力学软件 FULENT 的 Realizable $k-\epsilon$ 模型,模拟室外无风情况下氢气泄漏过程的浓度分布情况,得出高压储氢容器泄漏稳定扩散场。在此基础上,通过对仿真数据进行回归分析获得模型参数,建立泄漏稳定扩散场

的参数模型。

1 氢泄漏扩散场数值模拟

氢气泄漏扩散过程包括两个方面:一方面,泄漏的氢气不断与环境中的空气进行混合,即存在流体组分传输;另一方面,氢气泄漏扩散是一种强湍流状态^[5]。因此,在对氢气泄漏扩散进行数值模拟过程中,需要对这两种过程选择相应的计算模型,即组分传输模型和湍流计算模型。

1.1 氢泄漏过程组分传输模型

高压储氢容器或输氢装置的氢气泄漏过程是一个典型的超高度欠膨胀射流过程,且在泄漏过程中存在物质组分传输现象,因此,在模拟仿真过程中需要利用组分传输方程对各组分进行分析。

该方程是一个典型的质量守恒方程,可表示为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \text{div}(\rho \mathbf{v} Y_i) = -\text{div} \mathbf{J}_i + R_i + S_i \quad (1)$$

其中 Y_i 和 R_i 分别为第 i 种组分的质量分数和净产生速率; $\mathbf{v}$ 为扩散速度矢量, S_i 为离散项及用户定义的源项导致的额外产生速率; ρ 为扩散气体密度;

$\mathbf{J}_i$ 为物质 i 的扩散通量, $\mathbf{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_i}\right) \nabla Y_i$,

$Sc_i = 0.7$ 为湍流施密特数, μ_t 为湍流黏性系数,

① 863 计划(2006AA05Z141)资助项目。

② 男,1970 年生,博士,副研究员;研究方向:设备监控诊断,新型传感器;联系人, E-mail: qgj@nudt.edu.cn (收稿日期:2009-09-15)

$D_{i,m}$ 为混合物中第 i 种物质的扩散系数。

将 $N-1$ (N 为系统内部物质组分总数,除去空气中氮气)种组分,分别代入式(1)可得到 $N-1$ 个可解方程。不考虑发生燃烧、爆炸等化学反应,则 R_i 和 S_i 均为 0。上式即构成了氢泄漏过程组分传输模型。

1.2 氢泄漏扩散过程湍流计算模型

氢泄漏过程是一个典型的湍流过程。根据对 Reynolds 应力作出的假定或处理方式不同,目前常用的湍流模型主要包括 Reynolds 应力模型和涡黏模型等。在湍流涡黏模型中,Realizable $k-\epsilon$ 模型对于模拟广泛的流动现象尤为有效,该模型通过引入湍动能 k 和耗散率 ϵ 的方程进行计算^[6]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \epsilon u_i) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \\ + C_1 \frac{\epsilon}{k} C_3 G_b + S_\epsilon \end{aligned} \quad (3)$$

其中: ρ 为扩散气体密度; k 为湍动能; μ_t 为湍流黏度系数(空间坐标的函数,取决于流动状态); μ 为动力黏性系数; $\sigma_k = 1.0$ 和 $\sigma_\epsilon = 1.3$ 分别是 k 方程和 ϵ 方程的湍流普朗特数; G_k 是由层流速度梯度而产生的湍流动能; G_b 是由浮力而产生的湍流动能; Y_M 为可压缩湍流中过渡扩散产生的波动; S_k 和 S_ϵ 为用户自定义的源项; ϵ 为耗散率; $C_1 = \max[0.43, \frac{\eta}{\eta+5}]$, $\eta = S \frac{k}{\epsilon}$, $S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$, $S_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i})$; $C_2 = 1.68$ 为模型常量; C_3 为可压流体流动计算中与浮力相关的系数,主流方向与重力方向平行时 $C_3 = 1$,主流方向与重力方向垂直时 $C_3 = 0$ 。

1.3 基于 FLUENT 软件的氢扩散过程模拟

采用 FLUENT 软件,对上述开放空间氢泄漏扩散场的组分传输模型和湍流模型进行计算。同时,为了简化模型,假设:(1)储氢容器压力稳定不变;(2)泄漏过程泄漏裂纹不扩展;(3)氢气泄漏方向为横向;(4)泄漏过程环境稳定无风。

经过仿真,图 1 给出了自由空间无风环境下,当泄漏孔径为 1mm 时,内压 10MPa 的储氢容器泄漏口附近稳定扩散对称面的速度分布,对比图 2 基于高

度欠膨胀射流理论计算的泄漏流场结构可以看出,模拟仿真计算结果与理论预测流场结果完全符合。

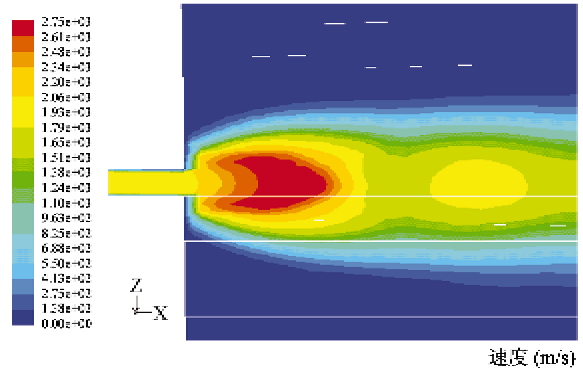


图 1 泄漏口附近氢气稳定扩散速度分布图

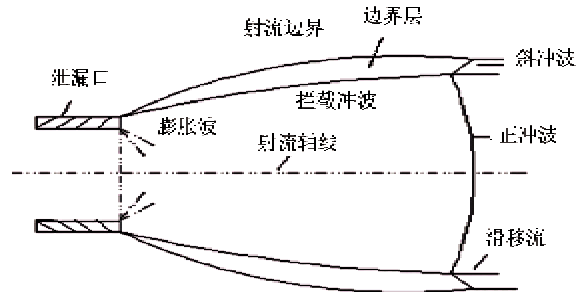


图 2 高度欠膨胀射流示意图

图 3 和图 4 分别给出了泄漏口附近稳定扩散对称面浓度分布图和射流轴线上质量浓度(范围为 4%~75%)的分布图。由图中结果可以看出,在氢气通过裂纹孔发生泄漏的过程中,由于内压很大,氢气出孔速度很快,受自身浮力的影响较小,当外界环境开放无风时,扩散很快进入稳定状态,且扩散浓度分布大致上关于射流轴线对称。泄漏氢气很快与外界空气形成混合气体,并随着射流距离的增大,卷入空气量也逐渐增大,在距漏点 190mm 处,氢气浓度已迅速下降至 4%。

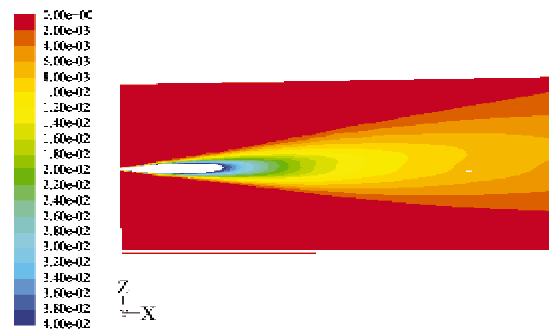


图 3 泄漏口附近扩散对称面氢气浓度分布图

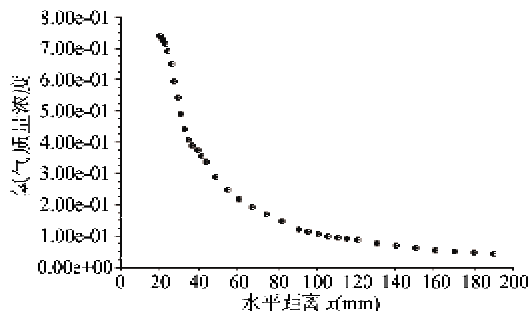


图 4 射流轴线上氢气质量浓度(范围为 4%~75%)分布图

2 泄漏扩散场参数回归建模

从前一节可以看出,扩散场数值模拟方法可以较客观地反映氢气实际扩散过程,但该方法计算量大,难以对每一个潜在泄漏点进行仿真。本节在上述模拟仿真结果的基础上,建立泄漏稳定扩散浓度场参数模型。

2.1 泄漏扩散浓度场参数模型

在泄漏点对称面上建立如图 5 所示的坐标系。设测点绝对坐标为 $p_i = (x_i, y_i)$, 相对坐标为 $p'_i = (x'_i, y'_i)$, ($i = 1, \dots, M, M$ 为测点数目)。泄漏点的绝对坐标为 (x_r, y_r) , 相对坐标为 $(0, 0)$, 则

$$\begin{cases} x'_i = x_i + x_r \\ y'_i = y_i + y_r \end{cases} \quad (4)$$

在用 FLUENT 软件仿真计算得到的氢气泄漏稳定扩散浓度场中选取 N 个测点, 并记为 $P = \{p_1, p_2, \dots, p_N\}$, 相应位置的氢气浓度值记为 $C = \{C_1, C_2, \dots, C_N\}$ 。建模问题可描述为寻求函数关系 $C_i = f(p_i) = f(x_i, y_i)$ 。

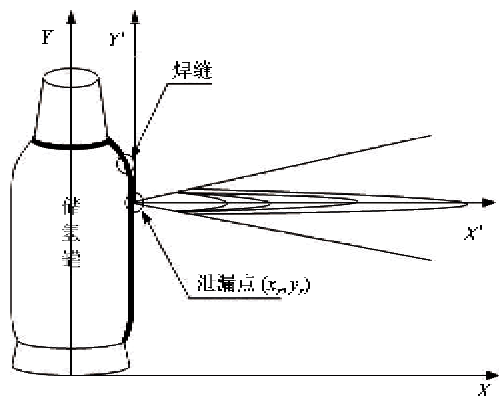


图 5 氢泄漏扩散场坐标系

泄漏稳定扩散场中, 氢气浓度随扩散距离的增大而迅速减小。为了建立扩散场参数模型, 在垂直对称面上将氢气扩散按 X 方向与 Y 方向进行分解,

氢气浓度为两个方向扩散的合成, 可写为

$$C(x, y) = f_1(x, 0) \cdot f_2(x, y) \quad (5)$$

其中 $C(x, y)$ 为 (x, y) 点的氢气浓度值, $f_1(x, 0)$ 为轴射流轴线上氢气浓度随距离变化的函数, $f_2(x, y)$ 为特定 x 切面上各点浓度与轴线上浓度的相对值随 x 和 y 变化的函数。

2.2 仿真数据回归分析

图 6 中实线显示了氢气浓度随横坐标 x 的变化, 运用曲线拟合即可求出浓度与 x 的关系 $\hat{f}_1$ 。这里, 采用双指数模型对 x 轴上的氢气浓度值进行拟合, 获得的拟合模型与结果分别如式

$$\hat{f}_1(x, 0) = 1.11e^{-0.018x} + 0.027e^{-0.001x} \quad (6)$$

和图 6 虚线所示, 可以看出二者基本吻合。

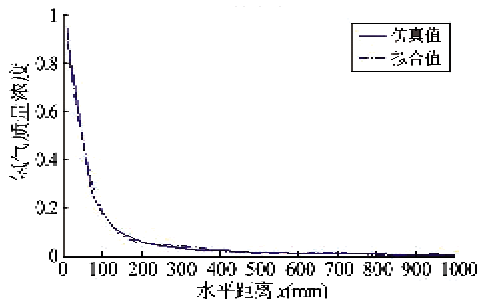


图 6 X 轴上的氢气质量浓度值

针对给定的不同 x , 对氢气浓度进行归一化处理, 即 $\hat{f}_2(x, y) = \frac{C(x, y)}{\hat{f}_1(x, 0)}$ 。当 x 为 50mm、110mm、150mm 和 250mm 时, 归一化氢气浓度 $\hat{f}_2(x, y)$ 随 y 的变化关系如图 7 所示。

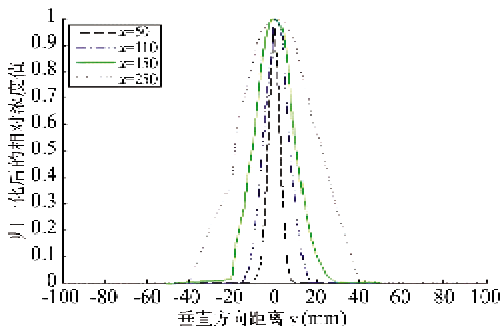


图 7 不同 x 下氢气浓度在 y 方向的分布状况

考虑图中曲线与正态分布十分近似, 假设存在函数关系式

$$\hat{f}_2(x, y) = a_x e^{-\left(\frac{y-b_x}{c_x}\right)^2} \quad (7)$$

运用式(7)对不同 x 值下归一化之后的浓度数据进行拟合, 可获得不同 x 下的拟合参数如表 1 所示。

为了简化参数,对参数 a_x 、 b_x 、 c_x 分别采用多项式进一步拟合,拟合结果如图 8 和表 2 所示。

表 1 待拟合参数表

$x(\text{mm})$	a_x	b_x	c_x	拟合误差
50	1.017	0.068	3.713	0.0015
75	1.019	0.06466	6.116	0.0075
100	0.9936	0.1778	7.958	0.01
150	1.022	0.2274	12.73	0.01
200	1.018	0.8062	18.83	0.02
250	1.021	1.245	24.26	0.025
300	1.027	1.793	30.5	0.03
350	1.025	2.48	36.72	0.03
400	1.021	2.991	41.9	0.025
450	1.023	4.064	49.43	0.027
500	1.018	4.696	54.94	0.016

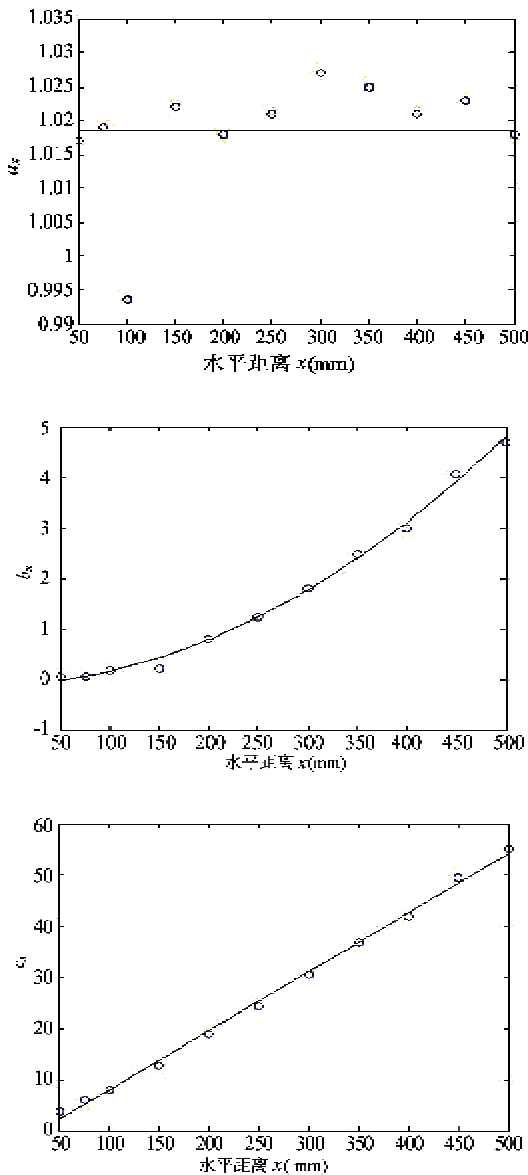


图 8 式(7)参数回归拟合结果

表 2 a_x 、 b_x 、 c_x 拟合公式

参数	拟合公式
a_x	$a_x = 1.0211$
b_x	$b_x = 1.794 \times 10^{-5} x^2 + 0.0008261 x - 0.0993$
c_x	$c_x = 0.1151 x - 3.46$

至此,氢气泄漏 x 方向与 y 方向扩散模型已完全得到,进而可得内压 10MPa 储氢容器泄漏孔径为 1mm 时,泄漏稳定扩散场任意一点的浓度估计式为

$$\hat{C}(x, y) = (1.11e^{-0.018x} + 0.027e^{-0.001x}) \times 1.02e^{-\left[\frac{y - (1.8 \times 10^{-5} x^2 + 0.0008x - 0.1)}{0.12x - 3.46}\right]^2} \quad (8)$$

为了验证指数模型的准确性,在泄漏场中任选 10 点,用式(8)对其进行估计,参数模型输出与仿真值的比较结果如表 3 所示。

表 3 参数模型输出与仿真值的比较

序号	x (mm)	y (mm)	估计 浓度	仿真 浓度	相对 误差
1	50	0	0.483	0.485	0.62%
2	60	0	0.4067	0.39	4.3%
3	90	10	0.0314	0.0385	18%
4	110	10	0.0568	0.046	23.5%
5	150	10	0.06	0.053	13.2%
6	150	0	0.0977	0.0986	9.1%
7	200	0	0.0523	0.061	14.3%
8	200	20	0.0198	0.023	13.9%
9	250	0	0.033	0.045	26.7%
10	500	0	0.0167	0.018	7.2%

可以看出,参数模型的估计结果与仿真浓度场中的值误差较小,模型对样本数据拟合效果好。虽然其中也有相对误差大于 20% 的仿真点(离回归样本点距离较远),但就整体而言,该模型较好地反映了整个浓度场信息,具有一定推广能力。

3 结 论

本文首先针对室外无风情况下高压储氢容器泄漏后的稳定扩散问题进行了数值模拟仿真。在此基础上,通过对仿真数据进行回归分析,建立了泄漏稳定扩散场的参数模型。结果表明,该模型可以较好地反映氢气泄漏场的真实状况,且具有一定推广能力。

氢泄漏扩散场的浓度分布,与储氢压力、漏孔

(缝)大小、空间环境(包括开放性、风向、风速等)、泄漏时间等都有密切关系,本文主要研究了室外无风情况下的稳定泄漏仿真和建模问题,所采用的方法和得到的结果对于进行其它情况泄漏的模拟仿真以及泄漏点定位具有一定的参考和实用价值,而各种复杂环境下氢泄漏浓度场随时间的变化关系还需要进一步深入研究。

参考文献

- [1] Swain M R, Grilliot E S. Dispersion of hydrogen clouds. In: Proceedings of the 2000 DOE Hydrogen Program Review, NREL/CP-570-28890
- [2] Swain M R, Filoso P, Grilliot E S, et al. Hydrogen leakage

into simple geometric enclosures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2003, 28: 229-248

- [3] Lee I D, Smith O I, and Karagozian A R. Hydrogen and helium leak rates from micro-machined orifices. *AIAA Journal*, 2003, 41(3): 457-464
- [4] Schefer R W, Houli W G, Sammarchi C, et al. Characterization of leaks from compressed hydrogen dispensing systems and related components. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2006, 31: 1247-1260
- [5] 余照. 氢泄漏与扩散数值仿真研究:[硕士学位论文]. 长沙:国防科技大学研究生院,2009.
- [6] 赵承庆,姜毅. 气体射流动力学. 北京:北京理工大学出版社,1998. 98-106

Stable diffusion modeling of hydrogen leakage based on numerical simulation and regression analysis

Qin Guojun^{*}, Yuan Jiehong^{**}, Hu Niaoqing^{*}, Gu Huanyun^{*}, Yu Zhao^{**}

(^{*} College of Mechatronics Engineering and Automation, National University of Defense Technology, Changsha 410073)

(^{**} College of Military Basic Education, National University of Defense Technology, Changsha 410003)

Abstract

The research on stable diffusion of high pressure hydrogen tank leakage in the non-air-flow open circumstance was conducted. Firstly, the component transport equation and the realizable turbulent kinetic energy-turbulent dissipation rate ($k-\epsilon$) model in the FLUENT software were applied to numerical simulation of the diffusion field of hydrogen leakage, and the hydrogen concentration map of the diffusion field near the leak hole was obtained. Then, through a two-step regression of the simulation data in the jet-flow direction and its perpendicularity, a parameterized diffusion model for the hydrogen leakage from the tank with the pressure of 10MPa and an 1mm-diameter hole was built. The results showed that the simulation was identical with the theoretical prediction and the parameterized model was in accordance with the simulation.

Key words: high pressure hydrogen leakage, diffusion simulation, parameterized model, regression analysis, non-air-flow open circumstance