

气体扩散 CFD 建模敏感性分析

章博^{1,2}, 陈国明^{1,2}

1. 中国石油大学(华东)海洋石油装备与安全技术中心, 山东东营 257061

2. 中国石油大学(华东)安全工程系, 山东东营 257061

摘要 提出气体扩散计算流体力学建模敏感性分析的概念, 即从众多影响模拟结果的不确定性因素中找出对建模有重要影响的方面, 并监测、分析其对模拟结果的影响程度, 进而选定最佳建模参数的一种不确定性分析方法。建议敏感性分析顺序应为网格依赖、边界条件、湍流模型及求解控制参数分析。重点对网格依赖和湍流模型敏感性分析的原理和方法进行了论证, 并结合某高含硫集气站气体泄漏扩散建模进行了算例研究。研究表明, 网格依赖分析可在模型预测精度和计算成本间获取平衡点; 通过将各湍流模型预测结果与经验公式模型对比, 可选取最适合的湍流描述方法。敏感性分析对构建合适的计算模型, 提高计算精度, 降低计算成本具有重要意义, 是气体泄漏扩散建模中不可或缺的重要环节。

关键词 气体扩散; 计算流体力学; 敏感性分析; 网格依赖

中图分类号 X937

文献标识码 A

doi 10.3891/j.issn.1000-7857.2011.13.008

Sensitivity Analysis on Computational Fluid Dynamics Modeling of Gas Dispersion

ZHANG Bo^{1,2}, CHEN Guoming^{1,2}

1. Center for Offshore Engineering and Safety Technology, China University of Petroleum, Dongying 257061, Shandong Province, China

2. Department of Safety Engineering, China University of Petroleum, Dongying 257061, Shandong Province, China

Abstract The definition of sensitivity analysis on Computational Fluid Dynamics (CFD) modeling for gas dispersion has been presented. It is an uncertainty analysis method during the modeling process which firstly identifies the most sensitive ones from a number of uncertain factors, and then monitors and analyzes their impacts on the simulation results, and lastly selects the most suitable modeling parameters. The advised orders for the analysis should be grid dependency, boundary conditions, turbulence models, and parameter analysis for solution controls, successively. The analysis theories and methods for two key factors including grid dependency and turbulence model sensitivity have been discussed. A case study of gas dispersion in a station for high sulfide hydrogen natural gas gathering has also been carried out. The results show that grid dependency analysis could obtain a balance point between model prediction accuracy and computation cost; most suitable turbulence description method could be selected by means of comparison between the prediction results made by both turbulence models and empirical formulas. Sensitivity analysis is important for establishing proper computation models, enhancing prediction accuracy, and reducing computation costs, and it is an indispensable step for gas dispersion CFD modeling.

Keywords gas dispersion; CFD; sensitivity analysis; grid dependency

0 引言

计算流体力学(CFD)方法具有能经济高效地全面预测泄漏扩散浓度场的特点, 已成为预测气体泄漏扩散后果的重要研究手段。但由于 CFD 模型受诸如网格、湍流模型、离散方法

等因素影响, 计算结果具有一定不确定性。国外学者已开展了相应研究, 如 Chatwin 等^[1]研究了气体扩散中湍流统计方法对预测结果的影响, 是较早开展湍流描述方法分析的研究之一, Middha 等^[2]研究了网格疏密程度对预测气体扩散结果的

收稿日期: 2011-02-14; 修回日期: 2011-03-18

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金(10CX01001A); 国家科技重大专项(2008ZX05017)

作者简介: 章博, 讲师, 研究方向为油气安全工程, 电子邮箱: zhangbo@upc.edu.cn

影响,Gousseau 等^[3]研究了大涡模拟 (LES) 与 Reynolds 平均法 (RANS) 方法对扩散的影响等。这些研究对影响气体扩散建模的某一方面因素进行了探讨,但未能系统提出 CFD 建模敏感性分析的概念及应包括的各个因素;也有报道表明国内学者在 CFD 其他应用领域中考虑了模型的相关影响因素^[4-5],但在气体扩散领域对 CFD 模型敏感性研究涉及较少。本文将围绕气体泄漏扩散 CFD 模拟方法中有关敏感性分析的概念、分析顺序与方法及重要意义展开论述。

1 敏感性分析概念和步骤

气体扩散 CFD 建模敏感性分析是指从众多影响模拟结果的不确定性因素中找出对建模有重要影响的方面,并监测、分析其对模拟结果的影响程度,进而选定最佳建模参数的一种不确定性分析方法。诸多影响 CFD 模拟结果的因素中最重要的包括网格疏密程度、边界条件选择、湍流模型选择及求解控制方法等方面。按照 CFD 建模的逻辑顺序,推荐气体扩散 CFD 建模敏感性分析的步骤如下:构建计算区域几何模型并划分网格后应首先进行网格依赖分析,确定最佳网格;根据所确定的最佳网格,分析不同边界条件对计算结果的影响并选定正确的边界条件;进行湍流模型选择,考虑不同的湍流描述方法对计算结果影响;最后进行求解控制方法选择,在收敛速度及求解精度等方面获取平衡点。充分的敏感性分析有助于构建最佳的 CFD 模型,在保证模拟的正确性,提高计算效率等方面都具有重要意义,是进行精细模拟及开展大规模工程计算前的必需步骤。

本文将某高含硫天然气集气站气体泄漏扩散为例,介绍如何构建系统的敏感性分析方法。考虑到对于自然风场下不可压缩理想气体扩散建模问题相关的边界条件认识比较一致^[6-7],且求解控制参数影响的侧重点在于计算精度和效率而非模型本身,将重点讨论 CFD 模型中敏感性分析中的两个重点因素:网格依赖分析和湍流模型分析。

2 网格依赖分析

2.1 网格依赖分析原理

在一定范围内增加网格分辨率可提高计算精度,但超过某限定值后再提高计算精度则需要付出较大的计算成本;在一定范围内降低网格分辨率可提高计算速度,但超过某限定值后再降低分辨率则会导致计算精度受较大影响。网格依赖分析的目的在于辨别 CFD 计算结果是否依赖于网格质量,寻求计算精度及计算成本的平衡点,是确保 CFD 模型正确性及高效性的重要步骤,已受到国外学者的密切关注^[2-3,8]。尤其在网格应用于大规模工程计算之前,应通过网格依赖分析使得所选用的网格兼具计算精确性和经济性。网格依赖分析的典型方法为:划分一组不同疏密程度的网格,对重点及总体计算区域网格赋予不同的分辨率;按照研究问题构建 CFD 模型并进行试算,监测所关心的 CFD 求解重点参数是否随网格不

同而变化;最后根据依赖性分析的结果综合考虑精度及计算成本以确定最佳网格^[9],通常可选取计算结果不依赖于网格变化的最低数量网格供后继计算使用。

2.2 算例

算例设定为某高含硫天然气集气站,站场如图 1(a)所示。集气站场长约 150m,宽约 60m。站内主要设备有管架、井口、收发球器、站控室、天然气加热炉、分子筛塔、水套炉、节流装置、配套电器设备及分离器等设备。参照各个设备尺寸及距离,建立 Gambit 几何模型如图 1(b)所示。具体参数为长 250m,宽 120m,高 30m,站场区域内围墙间隔 5m。

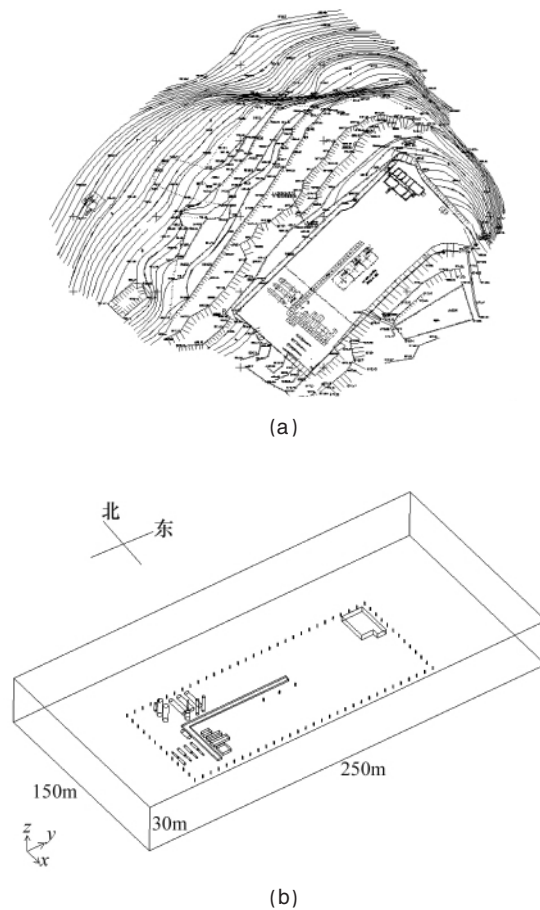


图 1 算例所用集气站 (a) 及其几何模型 (b)

Fig. 1 A gathering station for case study (a) and its geometry model (b)

本研究划分的集气站网格通过设置 size function 模块控制网格疏密程度和单元总数,共采用了 3 种 size function 递增比例,如表 1 所示,网格效果如图 2 所示。

为研究网格依赖性,设定如图 3(a)所示的泄漏口,并按照泄漏口下风方向可能的硫化氢扩散区域轮廓,设定 12 个监测点,平面布局如图 3(b)所示,监测点高 1.47m。计算条件设定为:天然气泄漏速率为 1.0kg/s,硫化氢含量为 15.16%,风速为 1.3m/s。

表 1 3 种计算网格对比

Table 1 Comparison of three computational grids used for dependency study

网格类型	size function	转换为 Polyhedra	
		前单元总数	后单元总数
密集网格	1:1.1	2107027	562635
中等网格	1:1.2	1241598	418746
稀疏网格	1:1.3	1046001	389164

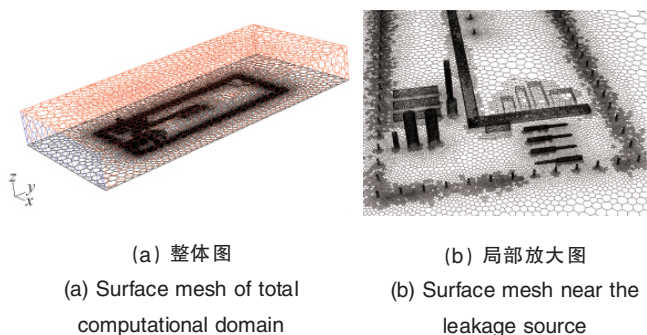


图 2 计算区域表面网格
Fig. 2 Surface mesh of computational domain

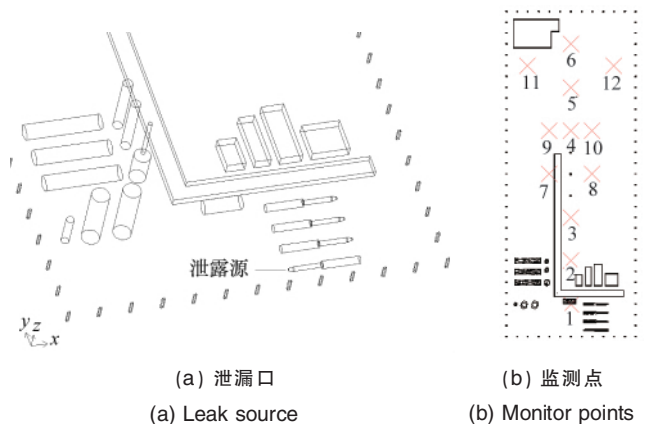


图 3 泄漏口和下风方向监测点示意图
Fig. 3 Leak source and downwind stream monitor points

选用 Fluent 无化学反应的组分运输模型建模, 通过第 i 种物质的对流扩散方程可预估每种物质的质量分数 Y_i 。守恒方程可表示为

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

其中, R_i 为化学反应的净产生速率, 对于无化学反应的组分运输模型, $R_i=0$; \mathbf{J}_i 为质量扩散; S_i 为离散相及由用户定义的源项导致的额外产生速率; ρ 为密度; \mathbf{v} 为速度矢量。边界条件来风方向设置为 velocity inlet, 泄漏口设置为 mass flow inlet, 地面设置为 wall, 其余各面设置为 outflow^[6-7]。

通过对守恒方程空间和时间上的离散化和迭代求解, 可得到各组分气体的实时浓度场。泄漏 10min 时刻, 3 种疏密程

度不同网格预测所得各监测点硫化氢浓度对比如图 4 所示。

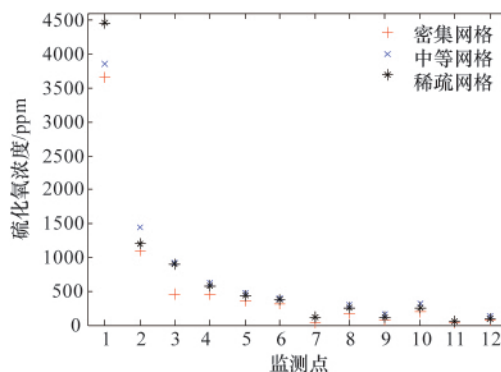


图 4 3 种网格预测 10min 时刻各点硫化氢浓度对比
Fig. 4 Comparison of H₂S concentration at the moment of 10 min predicted by three kinds of mesh

可见除监测点 1 的稀疏网格和监测点 3 的密集网格数据与其他两种对比差别相对较大之外, 3 种计算网格计算结果比较接近, 可认为计算结果不具备网格依赖性。为权衡计算时间和结果精确性, 本研究采用 size function 比例为 1:1.2 的网格作为计算网格。

3 湍流模型敏感性分析

3.1 湍流模型敏感性分析原理

目前的湍流数值模拟方法可分为直接数值模拟(DNS)方法和非直接数值模拟方法。DNS 方法理论上可以得到相对准确的计算结果, 但对计算机内存和计算速度要求非常高。非直接数值模拟方法设法对湍流作某种程度的近似和简化处理, 常用的有 LES 和 RANS 法等。LES 方法对计算机内存及 CPU 速度的要求仍比较高, 但低于 DNS 方法^[10]; RANS 的核心思维是求解时均化的 Reynolds 方程, 避免了 DNS 方法计算量大的问题, 同时也能获得一般工程应用所需的精度, 其常用模型包括 Reynolds 应力模型和涡黏模型等。

选择湍流描述方法时应综合考虑工程计算所需精度和计算成本, 如需要更多了解湍流细节, 则应选取 LES 方法; 若关注气体扩散带来的时均效应, 如人员中毒概率评估, 则可选择 RANS 方法等。选择了湍流描述方法后, 则应对比该方法中不同的湍流模型对计算结果的影响, 从而选择最合适的湍流模型。例如可通过将各湍流模型的 CFD 预测结果与试验结果或数学扩散模型预测结果进行对比, 根据其符合程度来选择合适的湍流模型。

3.2 算例

算例将对商用 CFD 软件 Fluent 所提供的几种 RANS 湍流模型进行敏感性分析, 拟根据 CFD 预测结果与 Pasquill-Gifford 扩散模型对比的符合程度来进行对比。

Pasquill-Gifford 模型认为, 位于地面 H 高处的连续稳态源的烟羽, 风向沿 x 轴, 风速恒定为 u, 坐标系中任意一点的

气体浓度由式(2)确定^[11]:

$$c(x,y,z)=\frac{Q_m}{2\pi\delta_y\delta_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\delta_y}\right)^2\right] \cdot \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\delta_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\delta_z}\right)^2\right] \right\} \quad (2)$$

其中, $c(x,y,z)$ 为某点气体浓度, Q_m 为连续稳态源质量流速, δ_y,δ_z 为烟羽扩散 Pasquill-Gifford 模型扩散系数,此处选取农村条件,大气稳定度为 C,则扩散系数为 $\delta_y=0.11x(1+0.0001x)^{-1/2}$, $\delta_z=0.08x(1+0.0002x)^{-1/2}$ 。

设定如图 3(a)所示的泄漏口,0.1kg/s 的硫化氢泄漏,风速为自西向东 1.3m/s。对比各湍流模型下监测点硫化氢浓度

预测结果与 Pasquill-Gifford 模型的符合程度。监测点 1 附近的障碍物对气体扩散影响较大,不将其纳入对比验证范围,其余 11 个监测点的对比情况如图 5 所示。通过对比分析,可见平均偏离程度最小的为 Realizable k-epsilon 模型,37%(图 5(c));偏离程度最大的为 Standard k-omega 模型,73.8%(图 5(e))。值得注意的是,Pasquill-Gifford 模型属于空旷地带气体扩散经验公式模型,对比所得 37%的偏离程度与本算例中的障碍物、地表粗糙度、风速风向等诸多实际情况有关。综合对比相关文献的研究,可认为该 CFD 模型与经验公式模型的预测结果^[12-14]比较一致。根据以上对比研究,可确定选择 Realizable k-epsilon 模型即能完成湍流模型敏感性分析。

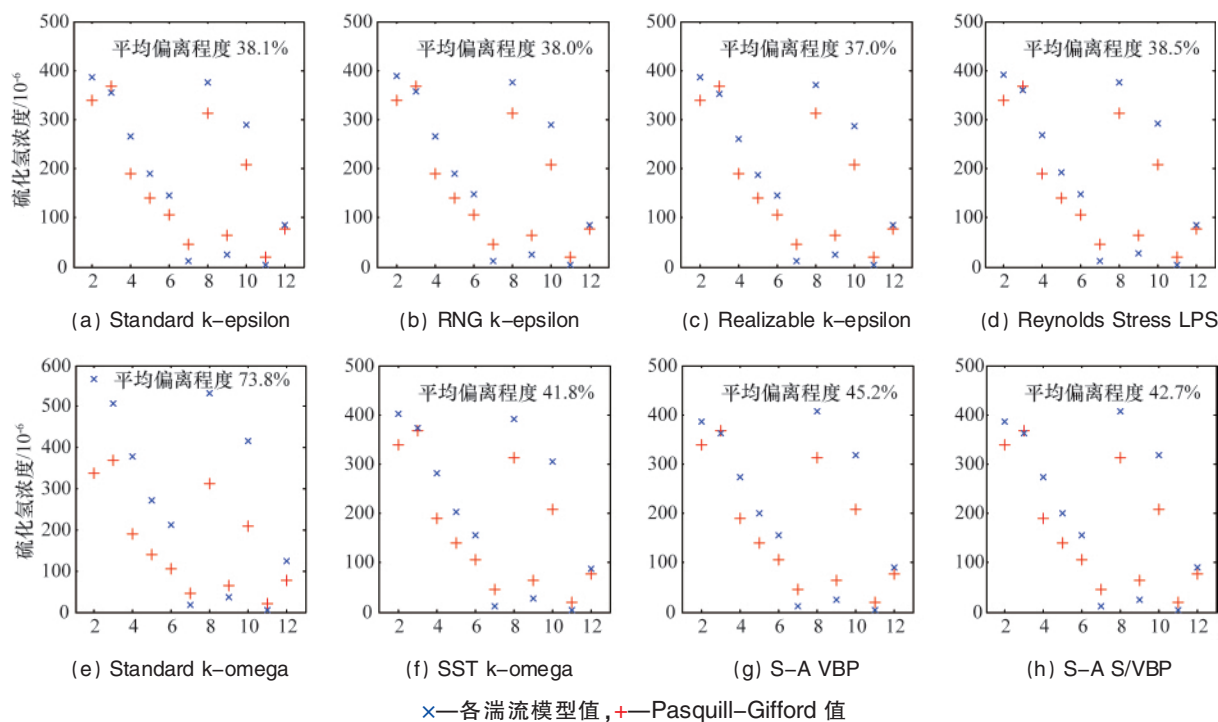


图 5 各湍流模型预测硫化氢浓度与 Pasquill-Gifford 模型预测值对比

Fig. 5 Comparison of H₂S concentration predicted by turbulence models and Pasquill-Gifford model

4 结论

以算例研究为例,利用计算流体动力学软件 Fluent,通过数值模拟及与经验公式模型对比验证,得出以下结论。

(1) 计算流体力学建模敏感性分析包括的主要内容以及推荐的分析顺序为:网格依赖分析、边界条件选择、湍流模型选择及求解控制方法分析。

(2) 网格依赖性及其湍流模型敏感性分析是 CFD 建模敏感性分析中的两个重要方面,通过网格依赖分析可在计算精度与计算成本中获取平衡点;通过湍流模型敏感性分析可确定最优的湍流统计方法,以最大程度符合实际情况。

(3) 气体扩散模拟 CFD 建模敏感性分析可提高模型的有效性和准确性,可在保证计算精度的前提下降低计算成

本,是进行精细 CFD 模拟的重要前置步骤,可为后继精细 CFD 模拟和大规模工程计算奠定基础。

参考文献 (References)

- [1] Chatwin P C, Mole N. Evaluation of statistical models in atmospheric dispersion modelling [J]. *International Journal of Environment and Pollution*, 2000, 14(1-6): 106-114.
- [2] Middha P, Hansen O R, Grune J, et al. CFD calculations of gas leak dispersion and subsequent gas explosions: Validation against ignited impinging hydrogen jet experiments [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2010, 179(1-3): 84-94.
- [3] Gousseau P, Blocken B, Stathopoulos T, et al. CFD simulation of near-field pollutant dispersion on a high-resolution grid: A case study by LES and RANS for a building group in downtown Montreal [J]. *Atmospheric*

- Environment*, 2011, 45(2): 428-438.
- [4] 闫敬华, 戴光丰, 袁卓建. CFD 方法在街巷气象场模拟和预测中的应用[J]. 气象, 2006, 32(11): 12-18.
Yan Jinghua, Dai Guangfeng, Yuan Zhuojian. *Meteorological Monthly*, 2006, 32(11): 12-18.
- [5] 潘沙, 冯定华, 丁国昊, 等. 气动热数值模拟中的网格相关性及收敛[J]. 航空学报, 2010, 31(3): 493-499.
Pan Sha, Feng Dinghua, Ding Guohao, et al. *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica*, 2010, 31(3): 493-499.
- [6] 章博, 陈国明. 基于 CFD 的毒气泄漏中毒定量评估 [J]. 安全与环境学报, 2009, 9(2): 158-160.
Zhang Bo, Chen Guoming. *Journal of Safety and Environment*, 2009, 9(2): 158-160.
- [7] 章博, 陈国明. 毒气泄漏环境下人员暴露风险评估 [J]. 石油化工高等学校学报, 2009, 22(2): 73-76.
Zhang Bo, Chen Guoming. *Journal of Petrochemical Universities*, 2009, 22(2): 73-76.
- [8] Coroneo M, Montante G, Paglianti A, et al. CFD prediction of fluid flow and mixing in stirred tanks: Numerical issues about the RANS simulations [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2011, doi: 10.1016/j.compchemeng.2010.12.007.
- [9] Zhang B, Chen G M. Quantitative risk analysis of toxic gas release caused poisoning-A CFD and dose-response model combined approach [J]. *Process Safety and Environmental Protection*, 2010, 88(4): 253-262.
- [10] Zhu Y, Chen G M. Simulation and assessment of SO₂ toxic environment after ignition of uncontrolled sour gas flow of well blowout in hills[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 178(1-3): 144-151.
- [11] Daniel A, Crowl J F L. Chemical process safety fundamentals with applications[M]. 2nd ed. Indianapolis: Prentice Hall PTR, 2002.
- [12] Sklavounos S, Rigas F. Simulation of Coyote series trials-Part I: CFD estimation of non-isothermal LNG releases and comparison with box-model predictions [J]. *Chemical Engineering Science*, 2006, 61(5): 1434-1443.
- [13] 黄琴, 蒋军成. 重气泄漏扩散实验的计算流体力学(CFD)模拟验证[J]. 中国安全科学学报, 2008, 18(1): 50-55.
Huang Qin, Jiang Juncheng. *China Safety Science Journal*, 2008, 18(1): 50-55.
- [14] Sklavounos S, Rigas F. Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2004, 108(1-2): 9-20.

(责任编辑 刘志远)

· 学术动态 ·



“2011 中国电工技术学会学术年会”征文

中国电工技术学会将于 2011 年 9 月在北京召开“2011 中国电工技术学会学术年会”。会议主题为“低碳智能电气, 持续创新科技”。

征文范围: 发电技术(火力发电、水力发电、燃气轮机发电、电厂自动化技术); 输、变、配电新技术(中、低压配电系统, 高、低压电器, 直流输电、柔性输电、特高压输电技术, 智能电网技术以及电力系统控制与保护技术); 电力电子、电机控制与传动、传感器技术; 电磁兼容技术; 电动车技术; 轨道交通技术; 超导技术; 防爆电器技术; 脉冲功率技术; 新电工理论、材料、工艺等; 电能质量新技术; 风力发电、太阳能光伏发电, 储能及并网技术; 电器智能化技术。

全文截止日期: 2011 年 6 月 30 日。

通信地址: 北京市三里河路 46 号(100823)王志华; 联系电话: 010-68595305; 传真: 010-68511242; 电子信箱: wangzhh@mei.net.cn。

会议网址: www.ces.org.cn/n11266382/n11276348/n11341946/12702271.html。



《科技导报》“研究论文”栏目征稿

“研究论文”栏目专门发表自然科学、工程技术领域具有创新性的研究论文, 要求学术价值显著、实验数据完整、具有原始性和创造性, 同时应突出重点、文字精炼、引证及数据准确、图表清晰, 并附中、英文摘要以及作者姓名、所在单位、通信地址、关键词等信息。在线投稿: www.kjdb.org。