

二维非定常储罐天然气泄露扩散算例

1 算例概述

本算例主要对二维非定常储罐天然气泄露扩散过程开展数值模拟。本测试测试目的是验证非结构多组分混合气体扩散数值模拟框架的计算精度。

测试环境：并行计算。

- [1]. 赵钟, 等. 风雷 (PHengLEI) 通用 CFD 软件设计[J]. 计算机工程与科学, 2020, 42(2): 210-219. (Zhao Zhong, et al. Design of general CFD software PHengLEI [J]. Computer Engineering & Science, 2020, 42(2): 210-219. (in Chinese))
- [2]. 赵钟, 等. 适用于任意网格的大规模并行 CFD 计算框架 PHengLEI[J]. 计算机学报, 2019, 42(11): 2368-2383. (Zhao Zhong, et al. PHengLEI: A Large Scale Parallel CFD Framework for Arbitrary Grids [J]. Chinese Journal of Computers, 2019, 42(11): 2368-2383. (in Chinese))

2 计算条件

大气环境下风速为 2m/s, 罐体内压力 8.3MPa, 温度为 35°C, 泄漏气体组分 Air、CH₄、H₂S、CO₂, 摩尔分数分别为 0.0, 0.75、0.16、0.09。

速度 (m/s)	压力 (Pa)	攻角 (°)	侧滑角 (°)	来流温度(K)
2	101325	0	0	308.15
壁温 (K)	参考长度 (m)	参考面积 (m ²)	参考点	
绝热壁面	1.0	1.0	(0.0, 0.0, 0.0)	

3 计算网格

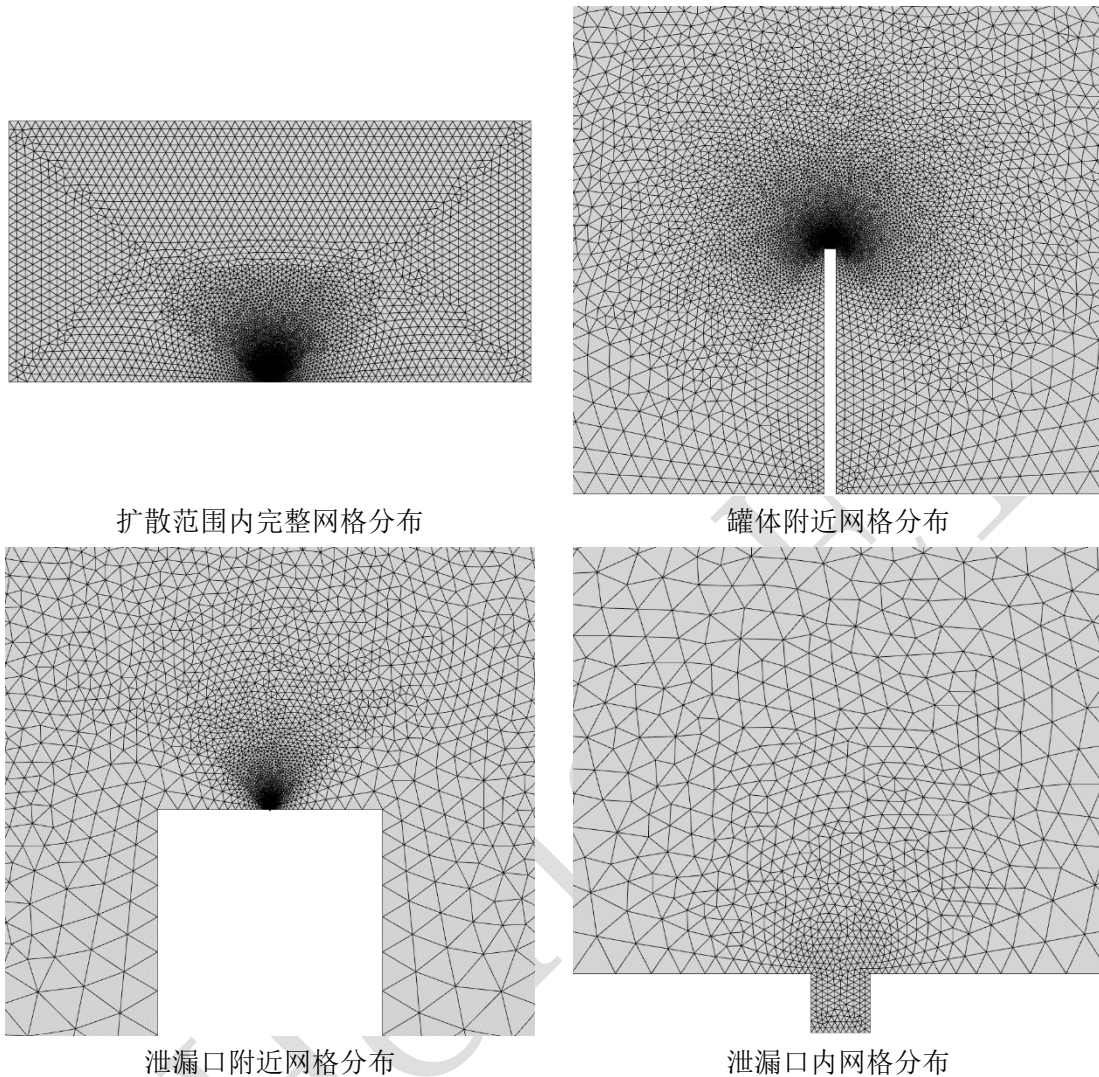


图 1 计算网格空间示意图

二维储罐气体泄露非结构网格见图 1 所示，计算域 x 范围为 $-1200\sim 1200\text{m}$ ， y 范围为 $0\sim 1200\text{m}$ 。罐体直径 2m ，高度 40m ，泄漏孔径 0.05m ，总网格量为 27762 。

4 参数设置

4.1 网格转换

网格转换: `key.hypara + grid_para.hypara`

文件	参 数	值	备注
key.hypara	ndim	2	空间维数
	nsimutask	1	任务类型
	parafilename	"/bin/grid_para.hypara"	参数文件路径
grid_para.hypara	gridtype	0	网格类型
	nAxisRotateTimes	0	坐标轴旋转次数
	axisRotateOrder[]	[1, 2, 3]	坐标轴旋转顺序
	axisRotateAngles[]	[0.0, 0.0, 0.0]	坐标轴旋转角度
	from_gtype	5	输入网格数据类型
	from_gfile	"/grid/yanchongCase14.cas"	输入网格路径
	out_gfile	"/grid/yanchongCase14.fts"	输出网格路径

在算例目录位置 shift+鼠标右键点击“在此处打开命令窗口”，串行计算。

执行命令：mpixec -n 1 ./PHengLEIv3d0.exe（可执行程序目录）。

4.2 网格分区

网格分区：key.hypara + partition.hypara

文件	参 数	值	备注
key.hypara	ndim	2	空间维数
	nsimutask	3	任务类型
	parafilename	"/bin/partition.hypara"	参数文件路径
partition.hypara	pgridtype	0	网格类型
	maxproc	4	分区数
	original_grid_file	"/grid/yanchongCase14.fts"	输入网格路径
	partition_grid_file	"/grid/yanchongCase14__4.fts"	输出网格路径

在算例目录位置 shift+鼠标右键点击“在此处打开命令窗口”，串行计算。

执行命令：mpixec -n 1 ./PHengLEIv3d0.exe（可执行程序目录）。

4.3 CFD 计算

CFD 计算: key.hypara + cfd_para_subsonic.hypara +boundary_condition.hypara

文件	参 数	值	备注
key.hypara	ndim	2	空间维数
	nsimutask	0	任务类型
	parafilename	"/bin/ cfd_para_hypersonic.hypara"	参数文件路径
cfd_para_	maxSimuStep	5000	迭代计算步数
	intervalStepFlow	100	流场输出间隔
	intervalStepPlot	10	可视化输出间隔
	intervalStepSample	1	监控点变量输出 间隔
	intervalStepForce	100	气动力输出间隔
	intervalStepRes	10	残差输出间隔
	attackd	0.0	攻角
	angleSlide	0.0	侧滑角
	wallTemperature	-1	绝热壁面
	inflowParaType	5	来流条件
	refDimensionalVelocit y	2.0	来流速度
	refDimensionalPressu re	101325	压力
	refDimensional Temperature	308.15	来流温度
	gridScaleFactor	1.0	网格缩放比
	forceReferenceLength SpanWise	1.0	参考展长
forceReferenceLength	1.0	参考长度	

subsonic.hypara	forceReferenceArea	1.0	参考面积
	TorqueRefX	0.0	参考点
	TorqueRefY	0.0	
	TorqueRefZ	0.0	
	knudsenLength	1.0	
	viscousType	1	粘性模型 (层流)
	viscousName	"laminar"	
	roeEntropyFixMethod	3	熵修正 (相关参数)
	roeEntropyScale	1.0	
	uns_scheme_name	"vanleer"	空间离散格式
	uns_limiter_name	"1st"	限制器 (系数)
	venkatCoeff	0.5	
	iunsteady	1	非定常
	physicalTimeStep	0.2	物理时间步
	min_sub_iter	50	最小子迭代步
	max_sub_iter	50	最大子迭代步
	tol_sub_iter	0.001	子迭代步误差
	CFLEnd	50.0	终止库朗数
	gridfile	"/grid/yanchongCase14__4.f ts"	网格文件路径
	plotFieldType	1	全流场输出
	nVisualVariables	13	可视化流场 变量输出
	visualVariables[]	[0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 38, 39, 40, 53, 54, 55]	
	ifSetDataMonitor	1	设置数据监控
nVisualWallVariables	6	可视化壁面流场 变量输出	
visualWallVariables[]	[0, 1, 2, 3, 4, 5]		
reconmeth	1		

	limitVariables	0	通量计算限制器
	limitVector	0	(相关参数)
	nchem	1	非平衡流
	nchemsrc	0	
	nchemrad	0	
	nIdealState	1	理想气体
	ntmodel	1	单温度模型
	gasfile	"Gas-Mixture"	气体混合模型
	speciesName	" Air,CH4,H2S,CO2"	组分名称
	initMassFraction	" 1.0,0.0,0.0,0.0"	组分质量分数
	nFraction	1	组分的初始分数 类型
	nLeakageMonitor	1	开启泄漏量监控
	totalLeakageVolume	1000	总的泄露体积
	monitorThresholdValue	0.05	监控阈值
boundary_condition.hypara	<pre> string bcName = "farinlet"; { int bcType = 5; int inflowParaType = 5; double angleSlide = 0; double attackd = 0; int directionMethod = 0; double initMassFraction[] = [1.0,0.0,0.0,0.0]; double refDimensionalPressure = 101325; double refDimensionalTemperature = 308.15; double refDimensionalVelocity = 2; string speciesName = "Air,CH4,H2S,CO2"; </pre>		空气入口 (Air)

	<pre> } </pre>	
	<pre> string bcName = "wall"; { int bcType = 2; double wallTemperature = -1.0; } </pre>	绝热壁面
	<pre> string bcName = "ycinlet"; { int bcType = 52; int directionMethod = 1; double direction_inlet[] = [0,1,0]; double initMassFraction[] = [0.0,0.75,0.16,0.09]; string speciesName = "Air,CH4,H2S,CO2"; double totalPressure = 8.3e6; double totalTemperature = 308.15; } </pre>	压力入口 (CH ₄ ,H ₂ S,CO ₂)
probes_XYZ.dat	4	监控点数
	28.678 55.643 0	监控点 1 坐标
	80.785 116.821 0	监控点 2 坐标

	125.335 158.357 0	监控点 3 坐标
	162.272 308.038 0	监控点 4 坐标

执行命令：mpixec -n 4./PHengLEIv3d0.exe（可执行程序目录）。

5 计算结果

6 结论

PHengLEI