

# Prediction of temporal and spatial distribution of hydrogen storage tank leakage and diffusion based on physical constraint neural network

Guanjun Wu<sup>1,2</sup> Guangwen Zhang<sup>1,2</sup> Xiaoxiao Dou<sup>1,2</sup> Xiaojing Hou<sup>1,2</sup> Xiaobo Hou<sup>1,2</sup>

1. National Key Laboratory of chemical Safety, Qingdao, Shandong, 266104, China

2. Sinopec Safety Engineering Research Institute Co., Ltd., Qingdao, Shandong, 266104, China

## Abstract

The combustible vapor cloud leaked from the hydrogen storage tank is easy to cause combustion and explosion accidents. In order to accurately predict the leakage and diffusion area, the computational fluid dynamics (CFD) tool was used to simulate the leakage and diffusion process, and the prediction model of the spatio-temporal distribution of hydrogen storage tank leakage accidents (HRS-PINN) was established, and compared with the prediction model based on pure data driven. The results show that the percentage error of leakage and diffusion distance of the proposed model is less than 15% compared with that of CFD simulation, and the calculation speed is three orders of magnitude faster, and the prediction accuracy is better than that of the traditional neural network model, which can provide an effective reference for emergency command and decision-making of hydrogen storage tank leakage and diffusion accident.

## Keywords

storage tank; leakage and diffusion; artificial intelligence; numerical simulation

# 基于物理约束神经网络的储氢罐泄漏扩散预测

武冠君<sup>1,2</sup> 张广文<sup>1,2</sup> 窦晓晓<sup>1,2</sup> 侯晓静<sup>1,2</sup> 侯孝波<sup>1,2</sup>

1. 化学品安全全国重点实验室, 中国·山东 青岛 266104

2. 中石化安全工程研究院有限公司, 中国·山东 青岛 266104

## 摘 要

储氢罐泄漏的可燃蒸气云易引发燃爆事故, 为准确预测泄漏扩散区域, 使用计算流体力学 (CFD) 工具对泄漏扩散过程进行模拟, 建立储氢罐泄漏事故时空分布预测模型 (HRS-PINN), 并与基于纯数据驱动的预测模型进行对比。结果表明, 本文提出的模型较CFD模拟的泄漏扩散距离百分比误差 $\leq 15\%$ , 计算速度快三个数量级, 且预测精度优于传统神经网络模型, 能够为储氢罐泄漏扩散事故应急指挥决策提供有效参考。

## 关键词

储罐; 泄漏扩散; 人工智能; 数值模拟

## 1 引言

随着全球能源需求持续增长, 氢气作为一种清洁高效的能源受到广泛关注和重视<sup>[1]</sup>。部分国家致力于构建从氢能生产、储存、运输到应用的全产业链, 将其作为未来清洁能源发展的重要方向之一<sup>[2]</sup>。目前常见储存容器主要为圆柱形储罐和球形储罐, 球形储罐的应用效果相对较好<sup>[3]</sup>。氢气储存过程存在一定安全隐患, 往往因材料腐蚀、阀门失效或疲劳损伤等原因产生裂纹, 从而导致氢气泄漏, 氢气扩散系数高, 极易在空气中迅速扩散, 爆炸极限范围较宽, 为 $4\%-75\%$ <sup>[4][5]</sup>,

泄漏的氢气与空气混合形成爆炸性混合物, 遇到高温或明火等引燃源时极易引发氢气云爆炸<sup>[6]</sup>。

国内外学者在氢气泄漏扩散预测领域开展了许多研究, 实验测试方面, 李雪芳<sup>[7]</sup>通过数值模拟与实验数据或理论模型计算结果进行了验证评估。经验模型方面, MICHAUX G<sup>[8]</sup>引入了带有紊流的浮力射流扩散模型描述氢气扩散动力学过程。数值模拟方面, 胡玮鹏<sup>[9]</sup>模拟了纯氢/掺氢天然气管道射流扩散, 并通过试验数据验证了模型计算的准确性。人工智能方面, Karniadakis<sup>[10]</sup>提出了物理信息神经网络这一创新计算框架。尽管国内外学者针对氢气泄漏扩散现象开展了多维度研究, 但仍存在以下问题: 实验研究成本高, 经验模型难以准确预测事故演变, 数值仿真方法存在计算效率局限, 人工智能模型依赖大量数据且缺乏可解释性。

【作者简介】武冠君, 硕士, 从事危化品应急响应技术及装备研究。

本文以储氢罐泄漏扩散为研究场景,通过构建包含纳维-斯托克斯方程(N-S方程)与组分输运方程残差的损失函数,强制网络输出满足物理约束条件,有效减少训练样本,提高模型在物理意义上的解释能力,突破纯数据驱动模型的黑箱局限。

## 2 储氢罐泄漏扩散的数值模拟

### 2.1 储氢罐泄漏模型

本文基于CFD方法构建了包含多物理场耦合的储氢罐泄漏数值模型,采集了泄漏扩散后的浓度分布、扩散距离数据,通过求解流体控制方程模拟预测泄漏过程,其中液相的体积分数方程可以表示为:

$$\frac{\partial(\rho_p \alpha_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \alpha_p \vec{v}_m) = -\nabla \cdot (\rho_p \alpha_p \vec{v}_{dr,p}) + \sum_{i=1}^{n_q} (m_{qp}^i - m_{pq}^i) \quad (1)$$

其中 $\vec{v}_{dr,p}$ 为液相相对于混合物质量中心的漂移速度矢量, $n_q$ 为气相中的物质数量, $m_{qp}^i$ 表示气相到液相的传质, $m_{pq}^i$ 表示液相到气相的传质。

Lee模型<sup>[11]</sup>作为多相流相变传热领域的理论模型,通过引入界面能量传递、质量扩散以及相间动量交换等关键物理机制,能够描述沸腾与冷凝的复杂相变问题,已被广泛应用于传质传热的数值模拟研究,公式如下:

$$\begin{aligned} m_{pq} &= \gamma_{eva} \alpha_p \rho_p (T_p - T_{sat}) / T_{sat}, T_p > T_{sat} \\ m_{qp} &= \gamma_{con} \alpha_p \rho_p (T_q - T_{sat}) / T_{sat}, T_p < T_{sat} \end{aligned} \quad (2)$$

CFD模型的热力学参数设定如下,饱和温度 $T_{sat}$ 设定为20.28K,该值对应标准大气压下的氢相变临界点;蒸发系数 $\gamma_{eva}$ 和冷凝系数 $\gamma_{con}$ 均取0.25<sup>[12]</sup>;在多项流场建模过程中,相间滑移速度的定义采用公式3计算,阻力 $f$ 采用公式4计算<sup>[13]</sup>。

$$\vec{v}_{pq} = \frac{\tau_p}{f} \frac{\rho_p - \rho_m}{\rho_p} \vec{a} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} f &= 1 + 0.15 \text{Re}^{0.687}, \text{Re} < 1000 \\ f &= 0.0183 \text{Re}, \text{Re} > 1000 \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\tau_p$ 为液相粒子的弛豫时间,表征流体流动变化的特征时间尺度; $\vec{a}$ 为加速度矢量,与流场速度梯度直接相关; $\text{Re}$ 为雷诺数,作为无量纲参数影响流动形态;假设模拟过程不涉及化学反应,用于求解气相中物质的质量分数 $Y_q^i$ 的方程为:

$$\frac{\partial(\alpha_q \rho_q Y_q^i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q Y_q^i) = -\nabla \cdot \alpha_q [-(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_i})$$

$$\nabla Y_q^i] + m_{qp}^i - m_{pq}^i \quad (5)$$

其中 $Y_q^i$ 是气相局部质量分数, $D_{i,m}$ 为分子扩散率, $Sc_i$ 为湍流施密特数,表征湍流场中动量输运与质量输运相对效率的无量纲数。

DNS法求解完整的N-S方程,不引入任何湍流模型,该方法能够精准捕捉全尺度湍流涡旋,但计算成本极高,适用于低雷诺数流动;RANS法对N-S方程进行平均计算,通过引入 $k-\epsilon$ 、 $k-\omega$ 模型闭合,计算成本较低;LES法直接计算大尺度运动,小尺度运动用亚格子模型近似,计算成本介于DNS和RANS之间。本文使用 $k-\epsilon$ 模型进行湍流闭合,方程如下:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}) \frac{\partial k}{\partial x_j}] + P_k - \rho \epsilon \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \epsilon u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (7)$$

其中湍流粘性系数 $\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$ , $C_\mu=0.09$ , $C_{1\epsilon}$ 、 $C_{2\epsilon}$ 为模型常数 $C_{1\epsilon}=\max[0.43, \frac{1}{1+5}]$ , $C_{2\epsilon}=1.9$ , $P_k$ 为湍动能生成项, $\sigma_k$ 和 $\sigma_\epsilon$ 分别取1.0和1.2。

大气边界层风场采用如下经验公式<sup>[14]</sup>, $u_0$ 为 $z_0$ 处的风速:

$$u(z) = u_0 (z/z_0)^\theta \quad (8)$$

湍流动能和湍流扩散率定义为:

$$k(z) = \frac{3}{2} [u(z) i(z)]^2 \quad (9)$$

$$\epsilon(z) = C_\mu^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}}(z) / l(z) \quad (10)$$

湍流强度计算如下:

$$\begin{aligned} I(z) &= 0.1(z/z_g)^{-\theta-0.05}, z \geq 5m \\ I(z) &= 0.18, z < 5m \end{aligned} \quad (11)$$

$z_g$ 为大气边界层高度, $\theta$ 为地面粗糙度系数。

### 2.2 模拟基准数据集

本文选取4200m<sup>3</sup>的球形储氢罐作为模拟对象,其直径为20m,围堰长100m,宽60m,高2m,泄漏方向为X轴正方向。模拟储氢罐发生泄漏,泄漏点位于储罐右侧,采用标准化的参数控制体系构建基础数据集:以1秒为时间记录间隔,完整捕捉扩散动态演变过程,形成具有时序观测序列;设置9个不同泄漏速率等级,针对每个泄漏流量等级,实时采集扩散范围数据,为后续神经网络模型的训练与模拟提供训练样本集,确保模型能够有效学习不同泄漏速率下扩散过程的时空特征规律,为构建高精度的泄漏扩散预测模型奠定

数据基础。

### 3 基于物理约束神经网络的泄漏扩散时空分布预测

#### 3.1 模型基本结构

长短期记忆神经网络<sup>[15]</sup>引入了内部记忆单元  $C_t$ ，实现了状态信息的累计，其最终输出  $O_t$  受当前时刻输入  $X_t$ 、隐层  $H_{t-1}$  以及内部记忆单元  $C_t$  三部分影响，缓解了梯度消失问题，可将卷积神经网络（CNN）与长短期记忆神经网络（LSTM）融合构建用于预测氢气泄漏扩散过程的混合深度神经网络。本文采用的物理约束长短期记忆神经网络基本组成单元为5层全连接LSTM，第1层为输入层，2-4层为隐层，第5层为输出层，每一层的所有神经元都与相邻层的所有神经元相互连接，以Sigmoid作为激活函数，如公式12所示：

$$\text{Sigmoid}(x) = \frac{1}{1 + e^x} \quad (12)$$

本文建立的PINN模型在输入端利用泄漏源强、环境温度以及多种气象数据等参数，组成时间序列数据集，输出层包括速度、空间网格点监测浓度和动态扩散距离等；网络模型架构加入融合N-S方程的物理信息项。

#### 3.2 损失函数设计

本研究构建包含数据拟合项与物理约束项的复合损失函数，实现数据驱动建模与物理先验知识的深度融合优化神经网络的权重<sup>[16]</sup>，损失函数由数据拟合损失项（ $\text{loss}_{\text{tra}}$ ）和物理约束损失项（ $\text{loss}_{\text{phy}}$ ）组成，如公式13所示：

$$\text{Loss} = \lambda_1 \text{Loss}_{\text{tra}} + \lambda_2 \text{Loss}_{\text{phy}} \quad (13)$$

其中  $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$  为系数项，在训练过程中需要不断进行调整优化； $\text{Loss}_{\text{tra}}$  为数据拟合损失项，具体为训练数据于模型预测值之间的拟合偏差，本文使用训练集上的均方误差作为表征神经网络训练性能的损失函数，如公式14所示：

$$\text{Loss}_{\text{tra}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (14)$$

其中， $N$  为训练样本数量， $y_i$  为第  $i$  个样本的真实值， $\hat{y}_i$  为对应预测值。

$\text{Loss}_{\text{phy}}$  为物理约束项误差，储氢罐泄漏扩散过程实质上是氢气与空气在开放空间的混合运动，控制方程为多组分理想气体混合物的三维非定常可压缩N-S方程，可用以下公式描述：

$$\text{Loss}_{\text{phy}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |G(u^i, c^i, p^i)| \quad (15)$$

控制方程具体包括质量守恒方程（公式16）、动量守恒方程（公式17）、能量守恒方程（公式18）以及组分运输方程（公式19）。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial X_i} = 0 \quad (16)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial X_i} = \rho g - \frac{\partial p}{\partial X} + \frac{\partial T_j}{\partial X_j} \quad (17)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial[u_i(\rho E + P)]}{\partial X_i} = \frac{\partial \left[ \left( k_{\text{eff}} + \frac{c_p \mu_t}{\text{Pr}_t} \right) \frac{\partial T}{\partial X_j} + u_i (T_j)_{\text{eff}} \right]}{\partial X_j} \quad (18)$$

$$\frac{\partial \rho \omega_i}{\partial t} + \nabla(\rho \omega_i u) = \nabla(D \nabla \rho \omega_i) \quad (19)$$

其中， $\rho$  为密度， $P$  为压力， $u$  为速度， $T_{ij}$  为粘性应力张量， $E$  为每质量单位的总能量， $k_{\text{eff}}$  为有效导热率， $C_p$  为比热容， $\mu_t$  为湍流密度， $T$  为温度， $(T_{ij})_{\text{eff}}$  为有效粘性应力张量， $\omega_i$  为质量分数， $D$  为分子扩散系数。

定义边界守恒方程残差  $\Delta_{i,t}$ ，内部区域守恒方程残差  $\Delta_{j,k}$ ，物理约束损失函数项为两项残差和，简化后的物理约束损失函数项可以用公式20描述，总体损失函数可用公式21描述：

$$\text{Loss}_{\text{phy}} = \lambda_3 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{t=1}^{n_{\text{bon}}} \text{Sigmoid}(\Delta_{i,t}) + \lambda_4 \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^{n_b} \text{Sigmoid}(\Delta_{j,k}) \quad (20)$$

$$\text{Sigmoid}(\Delta_{j,k}) \quad (20)$$

其中  $\lambda_3$ 、 $\lambda_4$  为系数项， $n$  为内部区域监测样本数， $m$  为边界区域监测样本数。

$$\text{Loss} = \lambda_1 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda_2 \left( \lambda_3 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{t=1}^{n_{\text{bon}}} \text{Sigmoid}(\Delta_{i,t}) + \lambda_4 \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^{n_b} \text{Sigmoid}(\Delta_{j,k}) \right) \quad (21)$$

构建模型后，损失函数系数项等超参数需通过多次训练测试确定。

#### 3.3 模型预测及验证测试

本文使用HRS-PINN模型与BP神经网络对上述数据进行训练，通过预测结果与模拟结果之间的百分比误差评估模型效能。下图为HRS-PINN、BP神经网络分别以10秒为间隔得到的预测结果与Fluent模拟结果之间的百分比误差。

HRS-PINN预测值与模拟结果之间的准确率最小为85.3%，平均误差控制在  $\pm 10\%$  以内，说明通过在损失函数中内嵌N-S方程指导和约束神经网络的学习过程，有效提取了泄漏扩散的典型特征；BP神经网络预测值与模拟结果之间的准确率最小为67.5%，平均误差在  $\pm 30\%$  左右，分析预测失准主要源于两个方面：一是基于梯度下降的权值更新机制易陷入局部最小值，使网络训练难以获得全局最优解；二是纯数据驱动的建模方式在有限样本条件下训练过程存在欠拟合情况。在动态预测过程中，HRS-PINN模型的平均预测准确率达到  $90 \pm 5\%$ ，较传统BP神经网络模型的  $80\% \pm 15\%$  具有显著鲁棒性优势。且调用训练好的HRS-

PINN 模型预测所需时间 45.4 秒, BP 神经网络预测所需时间为 32.6 秒, 而数值模拟迭代计算时间超过 15 小时, 效率相差三个数量级, 此外, 调用 HRS-PINN 模型进行预测所需的计算成本也明显降低。

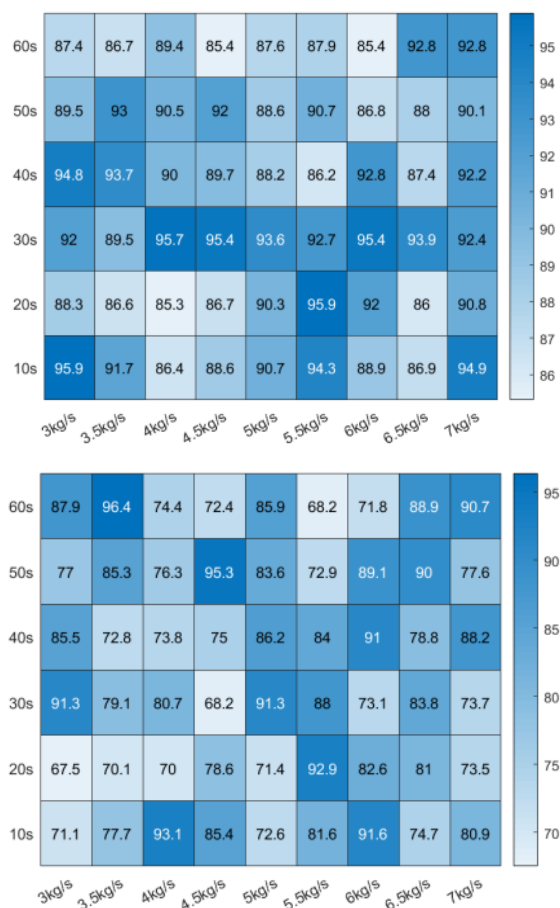


图 1 HRS-PINN 与 BP 神经网络预测值与模拟结果之间的百分比误差

## 4 结论与展望

本文提出了储氢罐泄漏扩散预测模型 -HRS-PINN, 实现了氢气泄漏扩散过程的秒级实时预测。采用模拟数据对模型进行训练, 通过在损失函数中添加 N-S 方程约束, 强制模型输出满足动量守恒、能量守恒等物理规律, 通过对比分析模型性能发现: 该模型与传统机器学习模型相比能够准确捕捉储氢罐泄漏扩散的时空演化特征, 在维持相同计算效率量级的前提下, 显著提升了泄漏扩散动态过程的模拟精度; 与商业仿真软件相比, 在满足工程计算精度要求时, 计算效率提升三个数量级以上。

将 HRS-PINN 模型应用于实际事故后果预测时, 通过获取实时气象数据与事故装置状态等多源数据, 将其输入 HRS-PINN 模型, 实现泄漏扩散演化趋势快速预测, 为应急决策提供辅助, 后续研究将聚焦于模型在高维复杂工况泄漏扩散场景下的适应性拓展。

## 参考文献

- [1] 王岚, 王子臻. “双碳”目标下中石化多元化经营探索[J]. 合作经济与科技, 2023, (19): 126-128. DOI: 10.13665/j.cnki.hzjjykj.2023.19.044.
- [2] 济民. 从地下到天空, 中石化发力新能源[J]. 中国石油石化, 2021, (03): 32-33.
- [3] 冯成, 周雨轩, 刘洪涛. 氢气存储及运输技术现状及分析[J]. 科技资讯, 2021, 19(25): 44-46.
- [4] 邝辰, 刘迪, 杨昊, 等. 氢气泄漏后燃爆风险研究现状综述[J]. 安全、健康和环境, 2021, 21(09): 1-5.
- [5] 周树辉, 王秀林, 段品佳, 等. 高压气态储氢技术形势分析[J]. 储能科学与技术, 2023, 12(08): 2668-2679. DOI: 10.19799/j.cnki.2095-4239.2023.0139.
- [6] 王继猛, 崔燕, 王鹏飞, 等. 大气环境影响下的高压氢储罐氢气泄漏爆炸事故后果模拟[J]. 湖南科技大学学报(自然科学版), 2024, 39(03): 30-35. DOI: 10.13582/j.cnki.1672-9102.2024.03.004.
- [7] 李雪芳. 储氢系统意外氢气泄漏和扩散研究[D]. 清华大学, 2015.
- [8] Shu Z, Liang W, Zheng X, et al. Dispersion Characteristics of Hydrogen Leakage: Comparing the Prediction Model with the Experiment[J]. Energy, 2021, 236(14): 121420. DOI: 10.1016/j.energy.2021.121420.
- [9] 胡玮鹏, 陈光, 齐宝金, 等. 埋地纯氢/掺氢天然气管道泄漏扩散数值模拟[J]. 油气储运, 2023, 42(10): 1118-1127+1136.
- [10] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations[J]. Journal of Computational Physics, 2019, 378: 686-707.
- [11] Lee W H. PRESSURE ITERATION SCHEME FOR TWO-PHASE FLOW MODELING[M]. [2025-03-31].
- [12] Jin T, Wu M, Liu Y, et al. CFD modeling and analysis of the influence factors of liquid hydrogen spills in open environment[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2016, 42(1): 732-739. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.162.
- [13] Mikko M, Veikko T, Sirpa K. On the mixture model for multiphase flow[J]. VTT Publications, 1996, 288.
- [14] Tominaga Y, Mochida A, Yoshie R, et al. AIJ guidelines for practical applications of CFD to pedestrian wind environment around buildings[J]. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 2008, 96(10-11): 1749-1761. DOI: 10.1016/j.jweia.2008.02.058.
- [15] Hochreiter S, Schmidhuber J. Long short-term memory. Neural Comput 1997;9:1735-80.
- [16] Karpatne A, Watkins W, Read J, Kumar V. Physics guided neural networks (PGNN): an application in lake temperature modeling. 2017