

文章编号:1673-5005(2014)04-0148-06

doi:10.3969/j. issn. 1673-5005. 2014. 04. 022

LNG 冷箱中降温过程的动态模拟并行计算

王 琳, 李玉星, 朱建鲁, 王娅婷, 盛欢欢, 王武昌

(中国石油大学储运与建筑工程学院, 山东青岛 266580)

摘要:由于单核计算无法承担 LNG 冷箱中降温过程动态模拟的高负荷,采用共享内存模式下的对称多核并行计算方法实现带预冷的氮膨胀液化流程中冷箱降温过程的动态模拟。动态模型中,板翅式换热器采用一维模型,压缩机、膨胀机和节流阀按稳态元件处理;并行方法中,根据并行机特征和液化流程特点进行计算单元的划分及边界耦合,利用路障对每个积分步进行同步控制,通过显式的函数调用进行单元间通信。将模拟结果与试验数据进行对比,验证动态模型和并行方法的合理性。模拟结果表明:工质的降温速率主要取决于膨胀机多变效率;该并行方法使模拟进程加速 23 倍,计算结点效率是单核计算的 3.83 倍。

关键词:天然气液化; 冷箱降温; 动态模拟; 多指令流多数据流; 多核; 并行计算

中图分类号:TE 646 **文献标志码:**A

引用格式:王琳, 李玉星, 朱建鲁, 等. LNG 冷箱中降温过程的动态模拟并行计算 [J]. 中国石油大学学报: 自然科学版, 2014, 38(4): 148-153.

WANG Lin, LI Yuxing, ZHU Jianlu, et al. Parallel computation of dynamic simulation of cool down process in LNG cold box [J]. Journal of China University of Petroleum (Edition of Natural Science), 2014, 38(4): 148-153.

Parallel computation of dynamic simulation of cool down process in LNG cold box

WANG Lin, LI Yuxing, ZHU Jianlu, WANG Yating, SHENG Huanhuan, WANG Wuchang

(College of Pipeline and Civil Engineering in China University of Petroleum, Qingdao 266580, China)

Abstract: As the single-core can't afford the high load of dynamic simulation of the cool down process in LNG cold box, a symmetric multi-core parallel computing method under shared memory was proposed to implement the dynamic simulation of the cool down process in cold box of nitrogen expansion liquefaction process with pre-cooling. In dynamic mathematical models, one-dimensional model is used in the simulation of plate-fin heat exchanger, and compressor, expander and throttle were treated as steady-state operations. In parallel methods, compute units were divided and coupled in the boundary based on the characteristics of parallel machine and liquefaction process. The simulation processes of parallel units were controlled using synchronization barrier, and the data were communicated through explicit function calls. The comparison of simulation results with experimental data shows that the dynamic models and parallel methods were reasonable. The simulation results show that the cooling rate of the working fluid depends mainly on the polytropic efficiency of the expanders. The result of performance test of parallel computation shows that the parallel method accelerates the simulation process 23 times, and the efficiency of computing nodes is 3.83 times the efficiency of the single-core computing.

Key words: natural gas liquefaction; cool down process in cold box; dynamic simulation; multiple instruction multiple data (MIMD); multi-core; parallel computation

天然气液化工艺中,天然气从常温冷却到液化温度,需要通过多次的热交换,这些换热过程主要通

过冷箱内不同温度级别的换热器来完成^[1]。带预冷的氮膨胀液化流程中,冷箱中工质降温过程的动

收稿日期:2013-11-23

基金项目:国家重大科技专项(2011ZX05026-006-07);中央高校基本科研业务费专项(13CX06064A)

作者简介:王琳(1986-),男,博士研究生,主要从事多相管流及油气田集输技术研究。E-mail:linew_wang@qq.com。

态模拟须进行预冷制冷剂、氮气制冷剂和原料气3种工质的物性计算,以及单相换热、沸腾换热和冷凝换热3种方式的换热计算^[2],且物性参数、换热特性随时间变化;多股流板翅式换热器通道排列,传热过程复杂,计算繁复^[3];而多级串联换热装置的结构单元多,流程复杂,进一步增加了动态数值模拟的复杂性和计算量。由于受计算机CPU频率和存储器访问速度的限制^[4],单核计算机系统性能达到极限,无法满足动态数值模拟的需要。并行计算是解决大数据量数值计算耗时过长的重要途径,其基础研究在计算数学和计算机科学领域开展较早^[5]。计算流体力学领域的并行计算技术应用研究取得了很多成果,科研人员在计算机集群网络环境下,结合并行机性能特征、应用程序执行特点和实际物理模型特征,将一批串行计算程序改造为并行计算程序,解决了工程设计中的一些关键气动力问题^[6-9]。但是,计算机集群分布式存储的特点对通信网络和并行机性能要求很高,且存在通信开销大的缺点。因此,笔者根据带预冷的氮膨胀液化流程中冷箱的结构特点和计算机性能特征采用一种共享内存模式下的对称多核并行计算方法进行冷箱降温动态模拟的多核并行计算,对动态模拟结果与试验数据进行对比分析,并对并行计算性能进行测试。

1 数学模型及数值方法

冷箱降温动态模拟过程中采用 Peng-Robinson状态方程和 van der Waals 单流体混合规则进行工质的相平衡及物性计算。

1.1 板翅式换热器

采用一维模型,并假设:流动稳定,换热器无漏热,无流动方向的导热。动量方程中忽略惯性项与对流项,忽略重力冲量,简化为摩擦力与压力冲量的关系式。热流控制方程^[2]经简化后如下:

质量方程为

$$\frac{\partial(\rho_h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_h u_h)}{\partial z} = 0. \quad (1)$$

式中, ρ_h 为热流体密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$; t 为时间, s ; u_h 为速度, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$; z 为长度, m 。

动量方程为

$$\frac{dp_h}{dz} + \frac{\lambda_h \rho_h u_h^2}{2D_h} = 0. \quad (2)$$

式中, p_h 为热流体压力, Pa ; D_h 为水力直径, m ; λ_h 为摩阻系数。

能量方程为

$$\frac{\partial(\rho_h h_h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_h u_h h_h)}{\partial z} = \frac{1}{A_h} \frac{\partial Q_h}{\partial z}. \quad (3)$$

式中, A_h 为横截面积, m^2 ; h_h 为热流比焓, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$; Q_h 为热流体换热量, $\text{J} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

同理可得相同形式的冷流动模型。

隔板能量方程为

$$\rho_w c_{p,w} A_w \frac{\partial T_w}{\partial t} = \frac{\partial Q_h}{\partial z} - \frac{\partial Q_c}{\partial z}. \quad (4)$$

式中, ρ_w 为隔板密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$; A_w 为隔板横截面积, m^2 ; T_w 为隔板温度, K ; $c_{p,w}$ 为隔板质量定压热容, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; Q_c 为冷流体换热量, $\text{J} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

式(3)、(4)和冷流的能量方程组成了板式换热器的动态换热控制方程,对其进行求解可以得到板翅式换热器的动态参数,具体的离散和求解过程见文献[10]。

1.2 压缩机和膨胀机

压缩机和膨胀机的响应时间与换热器相比要小很多,按稳态元件处理。带预冷的氮膨胀液化流程中,压缩机为预冷循环和氮气制冷循环提供动力,膨胀机是主要的制冷元件。压缩机与膨胀机的热力学过程相反,原理相似,热力学模型形式相同。压缩机特性方程^[11]如下:

多变压缩功为

$$H_{\text{pol}} = \frac{m}{m-1} RT_1 \left[\left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{m-1}{m}} - 1 \right]. \quad (5)$$

出口温度为

$$T_2 = T_1 \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{m-1}{m}}. \quad (6)$$

多变效率为

$$\eta_{\text{pol}} = \frac{H_{\text{pol}}}{c_p(T_2 - T_1)}. \quad (7)$$

式中, H_{pol} 为多变压头, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}$; η_{pol} 为多变效率; m 为多变指数; R 为气体常数, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$; c_p 为质量定压热容;下角标 1 代表入口状态,2 代表出口状态。

1.3 节流阀

节流阀的节流过程近似等焓过程,响应时间短,同样按稳态元件处理。节流阀安装在冷箱的原料气出口,用于节流 LNG,降低其压力,便于储存。节流阀特性方程^[12-13]为

$$W = K_v A_f \sqrt{2\rho(p_2 - p_1)}, \quad (8)$$

$$K_v = C_0 + C_1 \zeta + C_2 \zeta^2 + C_3 \zeta^3 + C_4 \zeta^4. \quad (9)$$

式中, W 为质量流量, $\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$; A_f 为阀门过流面积,

m^2 ; K_v 为流量系数; ζ 为阀门开度; $C_0 \sim C_4$ 为常数。

2 冷箱降温动态模拟的并行方法

高效并行算法的研究必须与具体的机器特征、物理过程特点相结合。本文中动态模拟计算均在 DELL Precision Work Station T7500 Tower 上进行, 处

理器为 Intel Xeon X5675 @ 3.07 GHz(六核); 天然气(原料气)降温主要通过冷箱内的 6 个串联板翅式换热器完成, 流程如图 1 所示。高温原料气通过 6 个换热器逐级降温至液化温度, 而氮气制冷剂通过膨胀机对外做功为原料气液化提供冷量, 制冷剂和原料气通过换热器进行热交换。

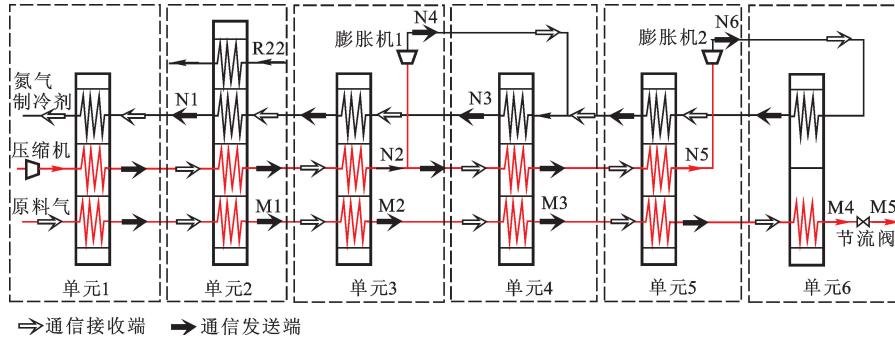


图 1 冷箱系统工艺流程及计算单元划分

Fig. 1 Process flow diagram of cold box and division of computing units

2.1 板翅式换热器的结构参数与网格划分

6 个板翅式换热器的翅片参数相同: 翅片厚度、高度、间距和有效宽度分别为 0.20、6.40、1.40 mm 和 0.50 m。采用简化后的一维模型进行板翅式换热器的动态传热计算。图 2 以单元 2 为例给出了板翅式换热器的流道分布与求解区域划分, 在边界网格上进行信息的接收与发送。冷箱中板翅式换热器参数见表 1。

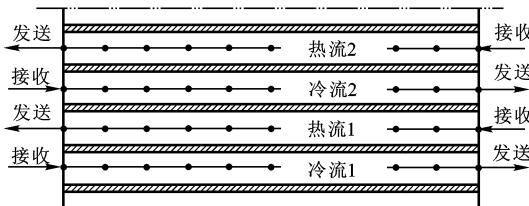


图 2 板翅式换热器(单元 2)流道分布及求解区域划分

Fig. 2 Channel arrangement of plate-fin heat exchanger(unit 2) and grid division

表 1 冷箱中板翅式换热器参数

Table 1 Parameters of plate-fin heat exchangers in cold box

单元编号 M'	隔板长度 L/m	隔板厚度 S'/mm	通道数 N'	通道网格数 n'
1	0.26	1.20	65	20
2	0.26	1.20	65	20
3	0.18	1.20	65	20
4	0.20	1.20	65	20
5	0.22	1.20	65	20
6	0.065	1.20	65	10

由于板翅式换热器通道多, 结构参数多, 即便采用一维网格进行动态计算, 计算量也相当巨大。如果将 6 个换热器串联的冷箱降温过程动态模拟计算集中在一个程序中进行, 计算任务只被分配在 1 个处理器(计算核心)上, 其余 5 个处理器闲置, 多核 CPU 并不能发挥其性能, 无法提高计算速度。因此, 实现冷箱中降温过程动态模拟的多核并行计算是提高计算速度的有效途径。

2.2 计算单元划分

根据液化流程的特点将冷箱降温动态计算模型划分为 6 个计算单元, 各计算单元通过接收端和发送端进行通信。图 1 给出了计算单元的划分方法和物流参数的通信方式, 通过主进程的控制将 6 个计算单元的计算任务分配到 6 个处理器上, 并进行数值计算的同步控制和单元间的通信, 从而实现流程模拟的分单元计算和边界耦合。

2.3 并行计算模式

通过计算单元的划分和计算任务的分配使动态模拟的并行计算方法与多核 CPU 相匹配, 形成如图 3 中多指令流多数据流(multiple instruction multiple data, MIMD)的体系结构。每个计算单元执行的子进程对应一个处理器结点, 各进程具有独立的堆栈和代码段, 可独立执行。利用同步路障对每个积分步进行同步控制, 使进程间的通信同步, 进程之间的通信通过共享内存中显式的函数调用来完成。

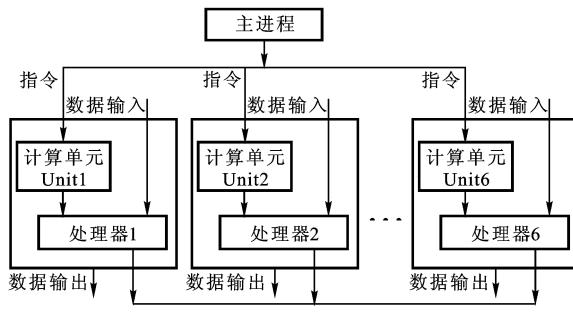


图3 多核并行计算的体系结构

Fig.3 Architecture of multi-core parallel computation

图4给出了动态模拟的多核并行计算流程图。其中,参数设置:在并行程序的用户界面上输入动态计算的自定义参数(总步数N、步长s、模型保存的间隔时间 S_i 、动态操作参数等)。

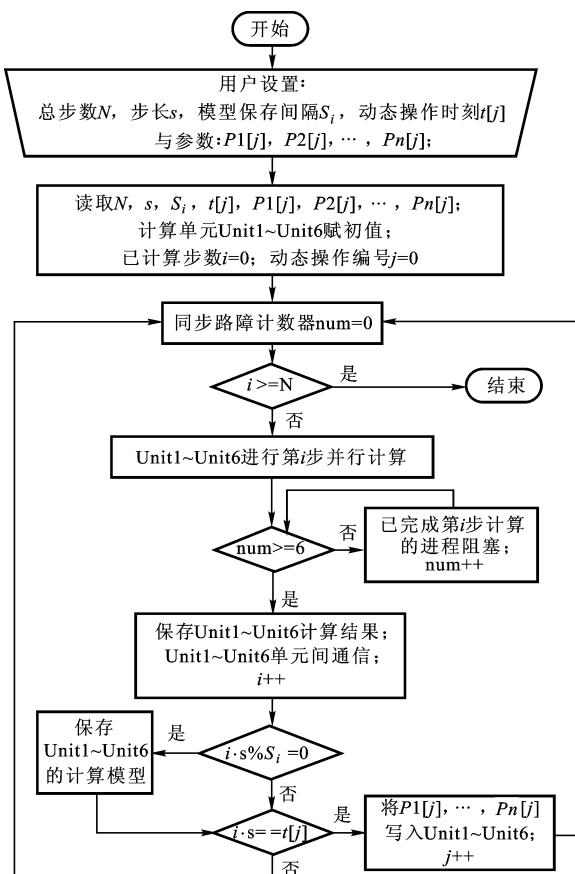


图4 多核并行计算流程图

Fig.4 Flowchart of multi-core parallel computation

程序运行步骤:

- (1) 读取自定义参数;对计算单元 Unit1 ~ Unit6 赋初值;初始化已计算步数 i 和动态操作编号 j。
- (2) 同步路障计数器初始化。
- (3) 判断已完成计算步数是否达到用户设置;若是,则计算结束;若否,则各计算单元同时开始第 i 步计算。

(4) 利用集中式同步路障计数器对各计算单元的进程进行同步控制,已完成第 i 步计算的进程阻塞,直至所有进程完成第 i 步计算。

(5) 保存计算单元 Unit1 ~ Unit6 的第 i 步计算结果;计算单元 Unit1 ~ Unit6 的各进程间通信;用已计算步数 i 计数。

(6) 判断是否到达模型保存时间;若是,保存模型;若否,不保存。

(7) 判断是否到达动态操作时刻;若是,则在计算单元内进行操作参数设置;若否,则不进行参数设置。

(8) 同步路障计数器初始化;循环进入下一步,直至完成所有超步(同步的周期)。

3 计算结果分析

利用小型撬装天然气液化装置进行冷箱降温过程的试验研究,试验系统详见文献[14]。考虑到试验的安全性,采用氮气作为原料气代替天然气进行液化。试验过程中的主要操作为氮气压缩机的启动,动态模拟过程中通过设置冷箱入口的氮气压力来模拟。氮气压缩机出口压力变化情况:时刻分别为0、0.25、0.50、0.78、1.39、1.75、2.25、3.50 h时对应的压力为191.09、230.16、573.87、772.28、843.1、935.29、1 004.88、1 110.5 kPa。

图5为冷箱降温过程中原料气、氮气制冷剂系统中试验温度与模拟值对比。由图5可见,模拟结果与试验值在大多数节点上吻合较好,验证了并行计算中应用的数学模型的合理性,板翅式换热器等设备的特性参数设置准确,物性、换热系数等参数计算准确,单元划分、路障同步等并行方法合理。

R22预冷后的原料气(图5(b)中M1)温度先上升后下降。这是由于初始时刻整个冷箱温度约为0℃,启动氮气压缩机后,其排气温度较高,经水冷后温度下降到20℃,进入冷箱后对换热器顶部流体有加热效果,随着预冷机组和膨胀机的启动,R22(二氟一氯甲烷)和低温氮气又使冷箱顶部的温度降低,因此M1的温度呈现先上升后下降的趋势。

节流后的原料气(图5(b)中M5)试验温度与模拟值相异。模拟过程中,根据压差计算流量,节流阀后的压力设为定值,2.75 h后节流阀出液,因此,模拟结果中原料气节流后温度从此保持不变。而试验中由于原料气压力不稳定,节流阀后的分

离器压力是变化的,从而造成试验结果与模拟值的差异。

图 6 为通过模拟计算得到的膨胀机多变效率变化曲线。综合分析可知:冷箱降温过程中随着膨胀机温度降低和入口压力升高,其多变效率不断增加;在高、低温膨胀机的进出口压力基本一致的情况下,高温膨胀机(膨胀机 1)进出口温差不断增加,低温膨胀机(膨胀机 2)温差基本不变的情况(图 5)与图

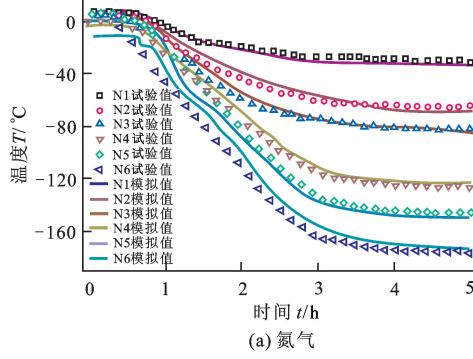


图 5 并行计算的氮气制冷剂及原料气温度与试验值对比

Fig. 5 Comparison of temperature curves of parallel computation and experiment results of nitrogen refrigerant and natural gas

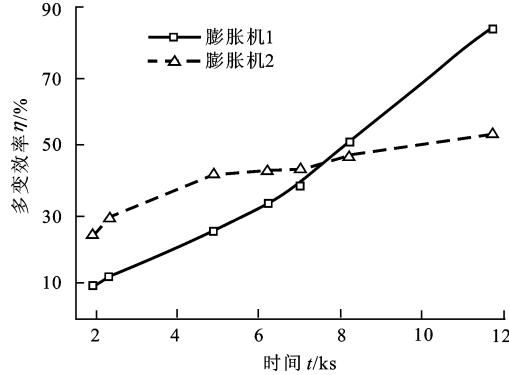


图 6 模拟过程中膨胀机多变效率变化曲线

Fig. 6 Variations of polytropic efficiency of expanders in simulation

4 并行计算性能测试

采用时间比率 $f(n, M)$ 、加速比 $S(n, M)$ 和结点效率因子 $e(n, M)$ 对并行计算性能进行评价,定义分别为

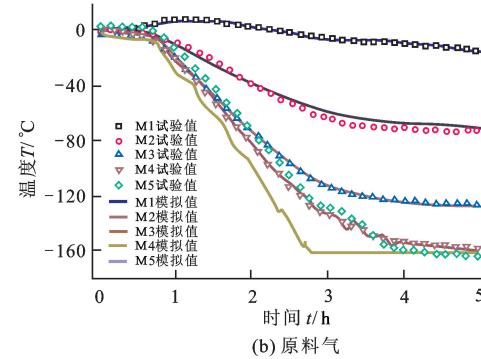
$$f(n, M) = \frac{t_{\text{phy}}}{t_{\text{sim}}} . \quad (10)$$

$$S(n, M) = \frac{f(n, M)}{f(1, M)} . \quad (11)$$

$$e(n, M) = \frac{S(n, M)}{n} . \quad (12)$$

式中, t_{phy} 为物理过程的实际时间; t_{sim} 为模拟计算用

6 中高温膨胀机多变效率不断增加而低温膨胀机多变效率基本不变的情况相符。上述分析表明:膨胀机的多变效率决定了冷箱降温过程中物流的温降速率,而多股流换热过程的影响较为次要。因此,可以通过提高膨胀机(特别是高温膨胀机)的多变效率或多变效率的增加速率来优化冷箱的降温速度,但为了防止换热器的热应力破坏,应保证降温速率在 30 °C/h 以内。



(b) 原料气

时; n 为计算结点(核心)数目; M 为计算规模,用网格数表示; $f(n, M)$ 为 n 个核心并行计算的时间比率; $f(1, M)$ 为最优单核串行计算的时间比率。

时间比率是实际物理现象时间与模拟计算时间的比值,反映计算速率的快慢;加速比表示并行计算与串行计算时间比率的比值,反映并行计算的加速倍率;结点效率因子 $e(n, M)$ 表示并行计算加速比与计算结点数的比值,反映并行计算中计算结点效率提高的倍数。

在冷箱降温动态模拟计算过程中采用单核串行计算对 5 h 的降温过程进行模拟,最快需要 7 d;而采用六核并行计算 7.25 h 内即可完成。并行计算加速比为 23,计算核心的平均效率提高为原来的 3.83 倍。表 2 为单核串行计算和多核并行计算的性能测试结果对比。

表 2 串、并行计算性能对比

Table 2 Performance comparison of parallel and serial computation

计算方法	n	M	$f(n, M)$	$S(n, M)$	$e(n, M)$
单核计算	1	7150	0.03	1	1
并行计算	6	7150	0.69	23	3.83

5 结论及应用前景

(1) 模拟结果与试验数据吻合程度较好,验证

了动态模型的准确性和并行方法的合理性。

(2)LNG冷箱中工质的降温速率主要取决于膨胀机的多变效率,多股流换热过程的影响较为次要。

(3)并行计算使模拟进程加速23倍,计算结点效率是单核计算的3.83倍,并行计算性能优越。

(4)分单元计算、边界耦合的并行方法是解决大数据量动态模拟计算的有效途径,而高效并行计算技术的研发必须与并行机性能、应用程序执行特点和实际物理模型特征相结合。

本文的并行方法不拘泥于单机多核环境,可以扩展到计算机集群环境下进行并行计算,但应注意异构环境中的负载平衡和通信开销问题。

参考文献:

- [1] 顾安忠. 液化天然气技术手册 [M]. 北京:机械工业出版社, 2010:474-484.
- [2] 王坤,徐风雨,李红艳,等. 小型MRC天然气液化装置中板翅式换热器动态特性仿真研究[J]. 低温工程, 2007,157(3):44-49.
WANG Kun, XU Fengyu, LI Hongyan, et al. Dynamic performance simulation of plate-fin heat exchangers in small scale MRC-LNG plant [J]. Cryogenics, 2007, 157 (3):44-49.
- [3] 王松汉. 板翅式换热器的电子计算机计算 [J]. 石化技术, 1980(3):367-380.
WANG Songhan. The electronic computer calculation of plate-fin heat exchanger [J]. Petrochemical Industry Technology, 1980(3):367-380.
- [4] 周伟明. 多核计算与程序设计 [M]. 武汉:华中科技大学出版社,2009.
- [5] 胡峰,胡保生. 并行计算技术与并行算法综述 [J]. 电脑与信息技术, 1999(5):47-59.
HU Feng, HU Baosheng. Parallel computing technology and parallel algorithms review [J]. Computer and Information Technology, 1999(5):47-59.
- [6] 李津,李忠泽,朱自强,等. 分区并行跨声速流的计算 [J]. 空气动力学学报, 1998,16(3):374-378.
LI Jin, LI Zhongze, ZHU Ziqiang, et al. The parallel computation of transonic flow [J]. Acta Aerodynamica Sinica, 1998,16(3):374-378.
- [7] 朱自强,麻晓波,付鸿雁,等. 流场分析和设计的并行计算 [J]. 科学技术与工程,2003,3(6):582-587.
ZHU Ziqiang, MA Xiaobo, FU Hongyan, et al. Parallel computation of flow field analysis and design [J]. Science Technology and Engineering, 2003,3 (6):582-587.
- [8] 周乃春,邓有奇,杨其德. 战术导弹绕流流场并行计算 [J]. 空气动力学学报,2002,20(sup 1):64-69.
ZHOU Naichun, DENG Youqi, YANG Qide. Parallel computation of tactical missile [J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2002,20(sup 1):64-69.
- [9] 温建华,朱自强,吴宗成,等. 基于N-S方程串并行计算的机翼优化设计 [J]. 北京航空航天大学学报, 2008,34(2):127-130.
WEN Jianhua, ZHU Ziqiang, WU Zongcheng, et al. Wing's optimization design using serial and parallel computations based on N-S equations [J]. Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics, 2008,34(2): 127-130.
- [10] 徐益峰,蔡祖恢. 平行流多流体板翅式换热器的动态数学模型 [J]. 化工学报,1998,49(6):721-728.
XU Yifeng, CAI Zuhui. Research on dynamic model of multi-fluid plate-fin heat exchangers [J]. Journal of Chemical Industry and Engineering, 1998, 49 (6):721-728.
- [11] 钱锡俊,陈弘. 泵和压缩机 [M]. 东营:中国石油大学出版社,2007:127-131.
- [12] 柯明纯. 液压马达和电液比例节流阀性能分析与测试的研究 [D]. 杭州:浙江大学机械与能源工程学院,2006.
KE Mingchun. Study on performance analysis and testing of hydraulic motor and electro-hydraulic proportional throttle [D]. Hangzhou: The Institute of Mechatronic Control Engineering of Zhejiang University, 2006.
- [13] 丁延鹏. 天然气管输系统快瞬变流动特性研究 [D]. 青岛:中国石油大学储运与建筑工程学院,2011.
DING Yanpeng. Study on the characteristics of fast transients in natural gas transmission system[D]. Qingdao: College of Pipeline and Civil Engineering in China University of Petroleum, 2011.
- [14] 朱建鲁,李玉星,王武昌,等. 晃荡条件下氮膨胀液化过程冷箱运行可靠性试验 [J]. 化工学报,2013,64 (4):1183-1190.
ZHU Jianlu, LI Yuxing, WANG Wuchang, et al. Reliability experiments in a cold box with nitrogen expansion liquefaction process running under sloshing conditions [J]. CIESC Journal, 2013,64(4):1183-1190.

(编辑 沈玉英)