

# Modelo Matemático de Optimización de un proceso de doble expansor de nitrógeno para la producción de Gas Natural Licuado (GNL).

## An Optimization Mathematical Model of a nitrogen dual expander process for Liquefied Natural Gas (LNG) production.

Presentación: 26/10/2023

**Carolina A. Ceratto**

Centro de Aplicaciones Informáticas y Modelado en Ingeniería (CAIMI), Zeballos 1346, Rosario, Argentina  
caroceratto@gmail.com

### Resumen

En este trabajo se aborda el modelado matemático de un proceso de obtención de Gas Natural Licuado (GNL) mediante un ciclo frigorífico de doble expansión utilizando nitrógeno como refrigerante. El ciclo de nitrógeno consta de cuatro etapas de compresión, una doble expansión y tres intercambiadores multi-corriente a través de los cuales se logra reducir la temperatura del gas natural presurizado para finalmente, mediante la caída abrupta de la presión, lograr la licuefacción. Para el abordaje del problema se propone un modelo matemático de optimización No Lineal (NLP) que se implementó en el lenguaje de programación algebraico GAMS. El modelo desarrollado se validó con resultados publicados y con el simulador comercial Hysys. Finalmente, se propuso como función objetivo la potencia neta requerida y se optimizó el perfil de presiones del ciclo de compresión, encontrando un descenso del 2.91% con respecto a los valores de referencia.

**Palabras clave:** GNL – GAMS – Programación No Lineal (NLP) – Optimización – Simulación

### Abstract

In this work, we address the mathematical modeling of a liquefied natural gas (LNG) production process using a double-expansion refrigeration cycle with nitrogen as the refrigerant. The nitrogen cycle consists of four compression stages, a double expansion, and three multi-stream heat exchangers, which are used to reduce the temperature of the pressurized natural gas. Ultimately, liquefaction is achieved through a rapid pressure drop. To tackle the problem, a Non-Linear Optimization (NLP) mathematical model is proposed and implemented using the GAMS algebraic programming language. The developed model was validated against published results and the commercial simulator Hysys. Finally, the net power required was chosen as the objective function, and the pressure profile of the compression cycle was optimized, resulting in a 2.91% reduction compared to the reference values.

**Keywords:** LNG – GAMS – Nonlinear Programming (NLP) – Optimization – Simulation

### Introducción

El gas natural ha ganado popularidad en las últimas décadas como una fuente de energía limpia y económicamente competitiva en comparación con otros combustibles fósiles, como el petróleo y el carbón. En particular, el gas natural licuado (GNL) es

preferido en el mercado (Kumar et al., 2011) porque, al licuarse, reduce su volumen unas 600 veces, lo que facilita y hace más seguro su comercio, transporte y almacenamiento.

El principal desafío en las plantas de GNL es el alto consumo de energía necesario para licuar la corriente de gas natural. La mayor parte del consumo total de energía ocurre en los compresores, donde el combustible se convierte directamente en trabajo mecánico o en electricidad en el caso de compresores eléctricos. Dada la escala de consumo de energía, cualquier mejora en su eficiencia energética resultará en una considerable reducción en el consumo de combustible y, en consecuencia, en la emisión de contaminantes.

Hay tres tipos de tecnologías de GNL: cascada, refrigerante mixto y basada en expansores. Las diferencias están relacionadas con la complejidad: la de cascada emplea tres ciclos separados, la de refrigerante mixto utiliza un solo ciclo y la tecnología basada en expansores utiliza un solo ciclo con refrigerante puro (He et al., 2018).

Los ciclos de expansión de nitrógeno son ampliamente utilizados, especialmente en plantas de GNL de pequeña escala y flotantes, debido a su simplicidad y menor cantidad de equipos. Dado que los ciclos de expansión suelen consumir más energía que los de refrigerante mixto, ya se han realizado algunos esfuerzos para reducir su consumo energético.

La simulación y más aún la optimización de este tipo de procesos resulta una tarea compleja debido a la no idealidad de las mezclas intervinientes. Numerosos autores han abordado el problema de simulación utilizando simuladores comerciales (Palizdar et al., 2019; Cavalcanti and Carvalho, 2021) y el de optimización manipulando el simulador a través de herramientas externas. (Moein et al., 2016; Santos et al., 2021, 2022)

En su trabajo (Palizdar et al., 2019) evaluó un proceso de expansión dual de nitrógeno a escala miniatura para la producción de gas natural licuado, para ello simuló en Hysys el proceso e hizo análisis exergoeconómicos convencionales y avanzados, y en base a este trabajo (Cavalcanti and Carvalho, 2021) realizó otro análisis exergoeconómico, pero aplicando la metodología SPecific Exergy COsting (SPECOC).

Por otro lado, (Moein et al., 2016) aplicó un algoritmo genético manipulando Hysys a través de Matlab, para optimizar un ciclo típico de doble expansión turbo de nitrógeno para una planta de producción de GNL y consideró el trabajo neto requerido del proceso como función objetivo. En este mismo trabajo, estudió el efecto de la adición de metano al ciclo de nitrógeno. Mientras que (Santos et al., 2021, 2022) empleó modelos derivados simplificados (Kriging surrogate models) para manipular Hysys desde Matlab con el objetivo de mejorar la eficiencia energética.

La ventaja de utilizar simuladores comerciales radica en la disponibilidad de numerosos módulos para representar los equipos del proceso y las propiedades fisicoquímicas de las sustancias. Sin embargo, la optimización de sistemas con elevada cantidad de grados de libertad resulta un problema difícil de abordar mediante su utilización.

Bajo este contexto, en el presente trabajo se propone desarrollar un modelo matemático para la optimización del proceso de producción de gas natural licuado (LNG) utilizando el software de optimización orientado a ecuaciones denominado GAMS (General Algebraic Modeling System). GAMS es una herramienta poderosa y versátil para el modelado matemático que ha demostrado ser altamente efectiva en la optimización de sistemas complejos. En primer lugar, se implementará el modelo matemático mencionado y se validarán sus resultados. Por último, se realizará la optimización del perfil de presiones de las etapas de compresión buscando minimizar la potencia requerida por el ciclo.

### *Proceso de licuefacción*

En la Figura 1 se muestra el proceso de licuefacción de gas natural, tomado de (Palizdar et al., 2019). El gas natural presurizado en el punto 0 ingresa a los intercambiadores de calor HE-1, HE-2 y HE-3, y se enfría hasta estar por debajo de su temperatura de saturación a las condiciones de la corriente 4. La válvula de estrangulamiento reduce la presión de manera que licúa la mezcla de

gas natural excepto un pequeño porcentaje de la corriente, que permanece en estado gaseoso. La temperatura más baja del gas natural ocurre después de la válvula de estrangulamiento, antes de la separación de fases. El gas natural líquido sale del separador vertical en el punto 35, y el porcentaje de corriente gaseosa fluye nuevamente hacia los tres intercambiadores de calor, como corriente fría hasta abandonar el proceso. Un sistema secundario (con compresores, enfriadores de aire y turbinas) se utiliza para generar energía y enfriar el gas natural líquido en los intercambiadores de calor. El sistema secundario utiliza nitrógeno como fluido de trabajo.

Los pares de compresor/enfriador de aire alternan desde el compresor C-1 a 5.95 bares hasta el compresor C-4, con el enfriador de aire AC-4 al final, alcanzando 40 bares. El refrigerante del sistema secundario regresa a HE-1 en el punto 6 y se enfría antes de entrar en ambas turbinas. El refrigerante del sistema secundario se divide en dos flujos, uno que entra en la primera turbina (EXP-1) y el resto en la segunda turbina (EXP-2). Las dos turbinas generan parte de la potencia consumida en los compresores. Parte del refrigerante del sistema secundario, que sale de EXP-2, se calienta en el intercambiador de calor (HE-3) antes de unirse al primer flujo que sale de EXP-1. La mezcla combinada de refrigerante del sistema secundario fluye hacia los intercambiadores de calor 2 y 3, y el proceso se reinicia. Los intercambiadores de calor son del tipo de múltiples corrientes utilizados en procesos criogénicos.

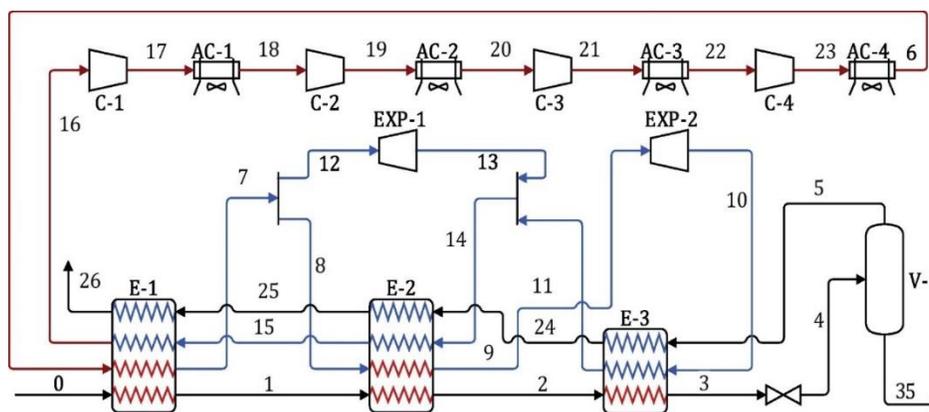


Figura 1. Flowsheet del proceso de licuefacción de gas natural

## Metodología

Para modelar este tipo de procesos se requiere una fisicoquímica rigurosa, es por eso que el modelo de Peng-Robinson es el más ampliamente usado en estos casos (Santos et al., 2021, 2022; Palizdar et al., 2019; Moein et al., 2016). Se debe a que la ecuación de estado de Peng-Robinson es adecuada para mezclas de componentes, principalmente hidrocarburos, y a su precisión en la representación de las fases gaseosa y líquida.

En primera instancia, se procedió a la creación de una librería termodinámica, tanto para el gas natural como para el fluido refrigerante, haciendo uso de la herramienta Extrinsic Functions de GAMS y empleando las ecuaciones de estado de Peng-Robinson. Esta herramienta permitió la formulación de un modelo matemático preciso y organizado. Las funciones desarrolladas se aplicaron en el cálculo de propiedades termodinámicas fundamentales, como la entalpía, entropía y fugacidades, tanto en fase vapor como en fase líquida. Además, estas funciones desempeñaron un papel esencial en el modelado del equilibrio físico-químico en situaciones donde coexistían ambas fases.

El modelo del proceso está conformado por los balances de materia y energía correspondientes a cada uno de los equipos considerados en el sistema bajo análisis. Estos balances, fundamentados en la conservación de masa y energía en cada unidad operativa, permiten la comprensión de las interacciones y flujos de materia y energía dentro del sistema, lo que a su vez constituye un elemento esencial para la posterior formulación y resolución de los problemas de optimización planteados en este trabajo.

Para la representación del proceso se asumen las siguientes hipótesis:

- Estado estacionario.
- Los procesos de compresión y expansión se consideran adiabáticos.
- No se consideraron los efectos de energía cinética ni energía potencial.
- Se definieron rendimientos isentrópicos tanto en los compresores (CP) como en las turbinas (EXP). El rendimiento de compresores se toma como un 80% y el de turbinas como un 85%.
- La válvula se considera una evolución isoentálpica.
- Se establecieron caídas de presión de 0.5 bar en los aero-enfriadores y en los intercambiadores multi-corriente.
- Los intercambiadores multi-corriente solo se modelaron con balances de materia y energía respetando un  $\Delta T_{\text{mín}} = 1 \text{ }^\circ\text{C}$  en los extremos del equipo.
- No se consideraron los perfiles internos de temperatura en los intercambiadores multi-corriente.

## Resultados y discusión

Los resultados obtenidos corresponden a la validación del modelo y a la optimización del perfil de presiones. Para la validación del modelo se compararon los parámetros operativos de temperatura, presión y flujo másico. En primera instancia, se compararon los parámetros obtenidos del modelo con los datos operativos del trabajo de referencia (Palizdar et al., 2019) y luego se validaron contra un simulador comercial, en este caso Hysys.

En la Tabla 1 se muestran en las primeras tres columnas los datos operativos de referencia, en las segundas tres los parámetros operativos obtenidos de la simulación con el modelo matemático desarrollado y en las últimas tres los parámetros obtenidos de la simulación con Hysys.

#	Datos de referencia (Palizdar et al., 2019)			Este trabajo			Hysys		
	T [°C]	P [bar]	m [kg/h]	T [°C]	P [bar]	m [kg/h]	T [°C]	P [bar]	m [kg/h]
0	35,000	60,000	461,780	35,000	60,000	461,780	35,000	60,000	461,780
1	-6,150	59,500	461,780	-6,150	59,500	461,780	-6,150	59,500	461,780
2	-83,140	59,000	461,780	-83,408	59,000	461,780	-83,408	59,000	461,780
3	-143,000	58,500	461,780	-143,241	58,500	461,780	-143,241	58,500	461,780
4	-152,340	2,530	461,780	-152,400	2,530	461,780	-152,401	2,530	461,780
5	-152,340	2,530	45,120	-152,400	2,530	45,119	-152,401	2,530	45,122
6	40,000	40,020	4256,270	40,000	40,020	4256,270	40,000	40,020	4256,270
7	-6,150	39,520	4256,270	-6,150	39,520	4256,270	-6,150	39,520	4256,270
8	-6,150	39,520	1625,410	-6,150	39,520	1625,410	-6,150	39,520	1625,410
9	-83,140	39,020	1625,410	-83,408	39,020	1625,410	-83,408	39,020	1625,410
10	-150,040	7,800	1625,410	-150,431	7,754	1625,410	-150,431	7,754	1625,410
11	-86,440	7,300	1625,410	-86,141	7,254	1625,410	-86,141	7,254	1625,410
12	-6,150	39,520	2630,860	-6,150	39,520	2630,860	-6,150	39,520	2630,860
13	-99,610	6,950	2630,860	-99,599	6,950	2630,860	-99,599	6,950	2630,860
14	-94,670	6,950	4256,270	-94,537	6,950	4256,270	-94,537	6,950	4256,270
15	-21,680	6,450	4256,270	-21,517	6,450	4256,270	-21,517	6,450	4256,270
16	36,920	5,950	4256,270	37,073	5,950	4256,270	37,073	5,950	4256,270
17	67,960	7,800	4256,270	68,091	7,800	4256,270	68,091	7,800	4256,270
18	40,000	7,300	4256,270	40,000	7,300	4256,270	40,000	7,300	4256,270
19	116,300	13,690	4256,270	116,272	13,690	4256,270	116,272	13,690	4256,270
20	40,000	13,190	4256,270	40,000	13,190	4256,270	40,000	13,190	4256,270
21	112,850	24,090	4256,270	112,875	24,090	4256,270	112,875	24,090	4256,270
22	40,000	23,590	4256,270	40,000	23,590	4256,270	40,000	23,590	4256,270
23	104,990	40,520	4256,270	104,977	40,520	4256,270	104,977	40,520	4256,270
24	-140,000	2,030	45,120	-140,000	2,030	45,119	-140,000	2,030	45,122

25	-50,000	1,530	45,120	-50,000	1,530	45,119	-50,000	1,530	45,122
26	25,000	1,030	45,120	25,000	1,030	45,119	25,000	1,030	45,122
35	-152,340	2,530	416,670	-152,400	2,530	416,661	-152,401	2,530	416,658

Tabla 1. Resultados obtenidos de la validación del modelo

Para la validación de los datos del modelo, se fijaron los valores de las variables que se consideraron críticas en el proceso, identificadas y resaltadas en amarillo en las segundas tres columnas en la Tabla 1. Las restantes variables se ajustaron mediante un procedimiento de minimización de la suma de las raíces cuadradas de las diferencias al cuadrado entre las variables del modelo y los datos correspondientes de dichas variables tal como se presentan en el trabajo de referencia, denotados con el índice \*.

$$\min z = \sum_k \sqrt{(T(k) - T(k)^*)^2} + \sum_k \sqrt{(P(k) - P(k)^*)^2} + \sum_k \sqrt{(\dot{m}(k) - \dot{m}(k)^*)^2} \quad [1]$$

Mediante la aplicación de esta metodología, se logró que la máxima discrepancia sea tan solo un 0.7524%. Esta cifra indica un exitoso proceso de validación de datos. Es relevante destacar que las principales diferencias se originan en el uso de ecuaciones de estado distintas: en este modelo, se emplearon las ecuaciones de estado de Peng-Robinson (PR), mientras que el trabajo de referencia utilizó la modificación de Peng-Robinson de Stryjek-Vera (PRSV). Otra fuente de variación se relaciona con el uso de bases de datos diferentes para los compuestos puros, además de la utilización de números truncados en los datos de referencia.

Con el propósito de proporcionar una validación sólida del modelo matemático desarrollado en GAMS, se procedió a la simulación del proceso utilizando Hysys, y se llevaron a cabo comparaciones de los resultados obtenidos para los parámetros operativos de interés. La metodología que se desarrolló fue utilizar los resultados del modelo matemático para cargar las variables en los módulos de los equipos, las variables que se fijaron en estos valores son las resaltadas en verde en la Tabla 1. En dicha tabla se muestran los resultados obtenidos con el simulador en las últimas tres columnas.

En la Figura 2 se muestran en rojo los errores porcentuales al comparar los parámetros operativos m (flujo másico), P (presión) y T (temperatura) obtenidos en este trabajo con los datos de referencia y claramente se puede ver que el error porcentual máximo es de un 0.7524%. Además, en verde se muestran los errores porcentuales al comparar este trabajo con la simulación en Hysys. La comparación resultó exitosa ya que la diferencia máxima se sitúa en un 0.0057%. Esto se aprecia en la última grafica de la Figura 2 en donde solo se muestran los errores por debajo del 0.02%.

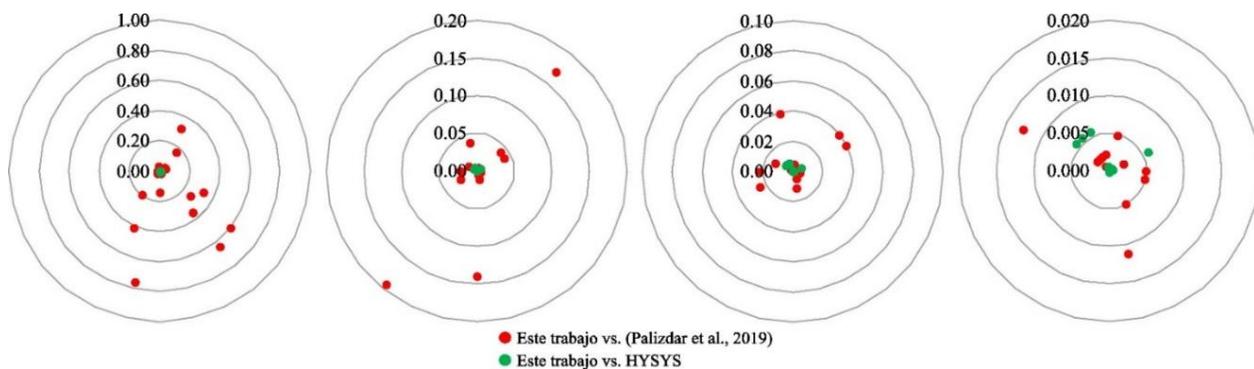


Figura 2. Errores porcentuales obtenidos en la validación del modelo matemático

Por último, se planteó la optimización de las etapas de compresión del ciclo frigorífico. Este objetivo se llevó a cabo manteniendo constantes todos los parámetros operativos del proceso, con la excepción de los niveles de presión y las temperaturas de las corrientes 17, 18, 19, 20, 21 y 22. En este contexto, se consideró el trabajo neto del proceso como función objetivo, y se procedió a su minimización.

$$\min z = W_{C_1} + W_{C_2} + W_{C_3} + W_{C_4} - W_{EXP_1} - W_{EXP_2} \quad [kW] \quad [2]$$

Optimización parcial del ciclo frigorífico	
$W_{\text{neto}}$ (Tabla 1)	214,91 kW
$W_{\text{neto}}$ con optimización parcial	208,83 kW
Presiones [bar] (Tabla 1)	Presiones con optimización parcial [bar]
$P_{17} = 7.80$	$P_{17} = 11.426$
$P_{18} = 7.30$	$P_{18} = 10.926$
$P_{19} = 13.69$	$P_{19} = 17.329$
$P_{20} = 13.19$	$P_{20} = 16.829$
$P_{21} = 24.09$	$P_{21} = 24.040$
$P_{22} = 23.59$	$P_{22} = 23.590$

Tabla 2. Resultados de la optimización parcial: comparación de los trabajos netos y niveles de presión.

Se realizaron comparaciones entre los resultados obtenidos revelando una reducción del trabajo neto en un 2.91 %.

## Conclusiones

Se desarrolló un modelo matemático para la simulación y optimización de un proceso de obtención de GNL mediante un ciclo frigorífico de doble expansión utilizando nitrógeno como refrigerante. Los resultados obtenidos fueron validados de manera satisfactoria mediante la comparación con valores publicados y con los arrojados mediante la simulación del proceso con Hysys. Por último, se optimizó el perfil de presiones de las etapas de compresión logrando una disminución en el trabajo neto consumido del 2.91%. Como trabajo futuro se propone ampliar el modelo matemático mediante el agregado del perfil interno de temperaturas de los intercambiadores multi-corriente. Esto permitirá lograr un descenso aun mayor del trabajo neto consumido ampliando los grados de libertad a todos los parámetros operativos del proceso.

## Referencias bibliográficas

- Cavalcanti, E. J. C., & Carvalho, M. (2021). Tackling Dissipative Components Based on the SPECO Approach: A Cryogenic Heat Exchanger Used in Natural Gas Liquefaction. *Energies*, 14(20), Article 20. <https://doi.org/10.3390/en14206850>
- He, T., Karimi, I. A., & Ju, Y. (2018). Review on the design and optimization of natural gas liquefaction processes for onshore and offshore applications. *Chemical Engineering Research and Design*, 132, 89-114. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.01.002>
- Kumar, S., Kwon, H.-T., Choi, K.-H., Lim, W., Cho, J. H., Tak, K., & Moon, I. (2011). LNG: An eco-friendly cryogenic fuel for sustainable development. *Applied Energy*, 88(12), 4264-4273. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2011.06.035>
- Moein, P., Sarmad, M., Khakpour, M., & Delaram, H. (2016). Methane addition effect on a dual nitrogen expander refrigeration cycle for LNG production. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 33, 1-7. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2016.04.061>
- Palizdar, A., Ramezani, T., Nargessi, Z., AmirAfshar, S., Abbasi, M., & Vatani, A. (2019). Advanced exergoeconomic evaluation of a mini-scale nitrogen dual expander process for liquefaction of natural gas. *Energy*, 168, 542-557. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.11.058>
- Santos, L. F., Costa, C. B. B., Caballero, J. A., & Ravagnani, M. A. S. S. (2021). Kriging-assisted constrained optimization of single-mixed refrigerant natural gas liquefaction process. *Chemical Engineering Science*, 241, 116699. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.116699>

Santos, L. F., Costa, C. B. B., Caballero, J. A., & Ravagnani, M. A. S. S. (2022). Framework for embedding black-box simulation into mathematical programming via kriging surrogate model applied to natural gas liquefaction process optimization. *Applied Energy*, 310, 118537. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2022.118537>