

Otimização multiobjetivo robusta do ciclo SMR considerando incertezas na temperatura ambiente

Matheus Antonio Moreno Pereira^a, Lucas Francisco dos Santos^b, Caliane Bastos Borba Costa^{a*}

^aUniversidade Estadual de Maringá, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Maringá-PR, Brasil

^bETH Zurich, Institute for Chemical and Bioengineering, Zurique, Suíça

* cbbcosta@uem.br

RESUMO

Este trabalho demonstra a relevância de incorporar incertezas na otimização de um processo de liquefação de gás natural do tipo *Single Mixed Refrigerant* (SMR). Compararam-se a otimização determinística na condição nominal com a otimização robusta, na qual os objetivos efetivos são definidos como médias amostrais do custo total anualizado e do indicador de potencial de aquecimento global sob cenários de temperatura do ar obtidos por amostragem estratificada de uma série histórica. As soluções determinísticas foram reavaliadas em todos os cenários para análise de factibilidade por meio de violação de restrição e falha na convergência do simulador. Observou-se que, embora as soluções determinísticas sejam mais eficientes na condição nominal, nenhuma permaneceu factível sob a variabilidade de temperatura ambiente, enquanto as soluções robustas mantiveram desempenho efetivo quantificável e operação viável.

Palavras-chave: Otimização robusta; Incertezas; Liquefação de gás natural; Custo total; Potencial de Aquecimento Global.

1. Motivação

O gás natural (GN) tem se destacado no debate energético por combinar competitividade econômica com combustão mais limpa quando comparado a outros combustíveis como carvão e gasolina (EIA, 2024). Entretanto, o transporte é uma etapa crítica e vulnerável da cadeia: à medida que a distância aumenta e os mercados se tornam mais dinâmicos, a logística via gasodutos perde a atratividade, enquanto a modalidade de transporte via gás natural liquefeito (GNL) viabiliza o comércio de longa distância e amplia a flexibilidade de suprimento (IEA, 2024; Molnar, 2022).

Apesar dessas vantagens, a liquefação é uma etapa energeticamente intensiva que depende de estrutura e equipamentos de grande porte e, portanto, demanda elevados custos de capital e operacionais, respondendo por uma fração relevante do custo total da cadeia do gás natural (Qyyum et al., 2018). Além disso, emissões operacionais associadas ao consumo energético e impactos incorporados na fabricação de infraestrutura e equipamentos podem reduzir a competitividade ambiental do gás natural (ICF, 2024; Mukherjee et al., 2025).

Portanto, torna-se necessário determinar uma condição ótima de operação dos processos de liquefação considerando seu desempenho econômico e ambiental. Contudo, esses processos estão sujeitos a variações externas que podem comprometer a operação e a eficiência da planta. A otimização robusta surge como uma alternativa, pois busca soluções com bom desempenho e baixa instabilidade sob incertezas. Embora existam contribuições relevantes, a literatura de liquefação de GN ainda apresenta número limitado de estudos que incorporam incertezas de maneira explícita e sistemática na otimização. Um dos primeiros trabalhos nesse sentido é Mortazavi et al. (2016) que demonstraram que ótimos determinísticos podem se tornar ineficazes sob variações na alimentação e que a otimização robusta é capaz de determinar soluções mais estáveis. Já Tsay e Baldea (2018) propuseram um *framework uncertainty-aware* para o processo *Single Mixed Refrigerant* (SMR), avaliando incertezas no projeto e na operação. Estudos mais recentes como Furda et al. (2025) avaliaram o impacto da composição da alimentação de GN em um processo de liquefação de gás natural. Ainda assim, são comuns formulações com escopo restrito, como a avaliação de um único objetivo e/ou análises *a posteriori*, reforçando a necessidade de demonstrações claras sobre como a incerteza impacta simultaneamente o desempenho e a factibilidade.

Diante desse cenário, este trabalho busca elucidar a fragilidade potencial de soluções determinísticas e preencher a lacuna de uma avaliação multiobjetivo do processo de liquefação SMR. Para isso, compararam-se

soluções obtidas por otimização determinística (na condição nominal) e por otimização robusta (objetivos efetivos definidos como médias amostrais) usando custo total anualizado e emissão de CO₂ equivalente como funções objetivo. A análise quantifica a perda da factibilidade e o *trade-off* entre o desempenho nominal e viabilidade operacional sob incertezas.

2. Metodologia

Esta seção descreve a modelagem e automação do ciclo SMR e a formulação das otimizações determinística e robusta.

2.1. Modelagem e otimização

A modelagem do processo foi desenvolvida no Aspen HYSYS v14, enquanto a automação das avaliações e a otimização foram implementadas no MATLAB R2022a. O caso estudado consiste em um ciclo de liquefação do tipo *Single Mixed Refrigerant* (SMR). A Figura 1 apresenta um fluxograma simplificado do SMR, o qual contém um ciclo de refrigeração para liquefazer o gás natural utilizando uma mistura de refrigerantes composta por nitrogênio, metano, etano, propano, i-butano e n-butano. O fluido refrigerante passa por etapas de compressão e resfriamento utilizando ar ambiente e é dividido em fase vapor e líquida por um separador de fases. O processo foi modelado em uma condição nominal de operação apresentada na Tabela 1, que define a base do projeto e fornece a referência para o dimensionamento e parametrização dos equipamentos.

Figura 1. Fluxograma simplificado do processo SMR (adaptado de Pereira et al. (2022))

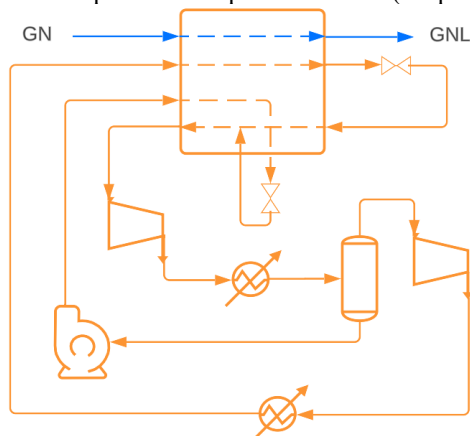


Tabela 1. Parâmetros do processo SMR

Item	Parâmetro	Valor
Alimentação de gás natural	Vazão mássica (t/h)	20,0
	Temperatura (°C)	30,0
	Pressão (kPa)	5.000,0
Composição molar do gás natural (%)	N ₂	0,30
	CH ₄	96,56
	C ₂ H ₆	2,90
	C ₃ H ₈	0,17
	iC ₄ H ₁₀	0,02
	nC ₄ H ₁₀	0,03
	iC ₅ H ₁₂	0,01
	nC ₅ H ₁₂	0,01
Pacote termodinâmico	Peng-Robinson	
Eficiência adiabática para compressores (%)		75
Queda de pressão nos resfriadores pós compressão (kPa)		0,0
Temperatura de saída nos resfriadores pós compressão (°C)		45,0
Temperatura do ar ambiente (°C)		22,6
Saída do gás natural liquefeito	Fração de vapor (%)	8,0
	Pressão (kPa)	120,0
	Corrente quente	100,0
Queda de pressão nos trocadores MSHE (kPa)	Corrente quente	100,0
	Corrente fria	10,0

Realização:

Na condição nominal, foram impostas especificações para representar alvos típicos de projeto, assim sendo possível definir especificações de projeto, como tamanho de todos os equipamentos e vazão do fluido refrigerante. Na etapa de avaliação do processo sob incerteza, as especificações de processo condição de saída do GNL e a temperatura-alvo após os resfriamentos intermediários e após o trocador de calor multicorrente foram liberadas, permitindo que as variáveis associadas sejam calculadas em resposta às entradas incertas, enquanto as especificações de projeto são fixadas. Essa abordagem assegura comparabilidade entre cenários sem redimensionamentos constantes.

A busca multiobjetivo foi realizada com *Multiobjective Particle Swarm Optimization* (MOPSO), extensão do PSO proposto por (Eberhart & Kennedy, 1995) e definido pelas Equações (1) e (2), visando aproximar a fronteira de Pareto por um conjunto de soluções não dominadas.

$$\vec{x}_i(z+1) = \vec{x}_i(z) + \vec{v}_i(z+1) \quad (1)$$

$$\vec{v}_i(z+1) = \omega \vec{v}_i(z) + c_1 r_1 (\vec{x}_{ndomi_i} - \vec{x}_i) + c_2 r_2 (\vec{x}_{líder} - \vec{x}_i) \quad (2)$$

nessas equações, z é a z -ésima iteração, \vec{x}_i é a solução ou posição da partícula i , \vec{v}_i é a velocidade da partícula, ω é o termo de inércia, r_1 e r_2 são variáveis aleatórias, c_1 e c_2 são coeficientes de aceleração, \vec{x}_{ndomi_i} representa a melhor solução não dominada já encontrada pela partícula e $\vec{x}_{líder}$ é um líder selecionado a partir de um repositório externo de soluções não dominadas (Coello e Reyes-Sierra, 2006). Na Tabela 2 são apresentados os limites inferior e superior das variáveis de decisão.

Tabela 2. Limites das variáveis de decisão

Variável	Inferior	Superior	Variável	Inferior	Superior
Vazão de N ₂ (t/h)	0,0	16,2	Vazão de iC ₄ H ₁₀ (t/h)	0,0	44,0
Vazão de CH ₄ (t/h)	3,8	18,2	Pressão de sucção (kPa)	110,0	550,0
Vazão de C ₂ H ₆ (t/h)	6.6	34,0	Pressão de descarga(kPa)	4500,0	5800,0
Vazão de C ₃ H ₈ (t/h)	0,0	116,0	Temperatura de saída do trocador (°C)	-60,0	20,0
Vazão de nC ₄ H ₁₀ (t/h)	0,0	44,0			

2.2. Otimização multiobjetiva robusta

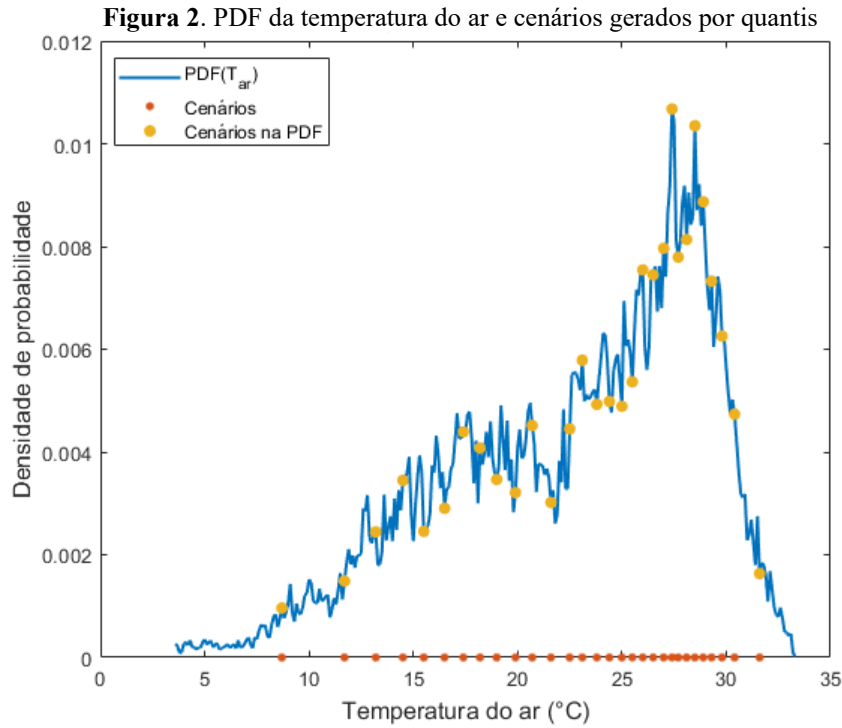
A incerteza avaliada neste trabalho é a temperatura do ar ambiente (T), obtida de uma base de dados representativa do Texas e da Louisiana durante todo o ano de 2024, extraída do NOAA NOS/CO-OPS (Center for Operational Oceanographic Product and Services). A temperatura nominal foi definida como a média da série histórica, $T_0=22,6$ °C. Para a avaliação robusta, foram gerados 30 cenários de temperatura por amostragem estratificada via quantis da distribuição empírica, garantindo estratificação uniforme do espaço de probabilidade (Equações 3 e 4)

$$u_k = \frac{k - 0,5}{n_k}, \quad k = 1, \dots, n_k \quad (3)$$

$$T^k = q_T(u_k) \quad (4)$$

Nas Equações (3) e (4), u_k é o nível de probabilidade acumulada associada ao k -ésimo cenário, n_k é o número total de cenários e q_T é a função quantil empírica obtida a partir da função de distribuição acumulada dos dados históricos de temperatura.

Para viabilizar a análise, a série histórica foi submetida a um tratamento: (i) valores ausentes ou nulos foram removidos; e (ii) valores extremos raros, de baixa representatividade estatística, foram filtrados por meio de um critério de *boxplot* baseado na regra de Tukey, em que observações abaixo de $Q_1 - 1,5IQR$ ou acima de $Q_3 + 1,5IQR$ são classificadas como *outliers* e removidas, onde Q_1 e Q_3 são o primeiro e o terceiro quartis e $IQR = Q_3 - Q_1$ é o intervalo interquartil (Tukey, 1977). Após a filtragem, a PDF foi estimada a partir do conjunto de dados remanescentes. A função densidade de probabilidade (PDF), bem como os cenários gerados são apresentados na Figura 2.



Foram avaliados dois objetivos conflitantes: o custo total anualizado (*Total annualized cost – TAC*) e o potencial de aquecimento global em um horizonte de 100 anos. O TAC foi estimado segundo a abordagem de (Turton et al., 2008), conforme implementações aplicadas a processos de liquefação de gás natural em (Pereira et al., 2022). O impacto ambiental foi estimado via Análise do Ciclo de Vida (*Life Cycle Assessment – LCA*) com um escopo *gate-to-gate*, considerando como fronteira apenas a etapa de liquefação, considerando apenas emissões indiretas associadas ao consumo de eletricidade. Nesta análise, o indicador de potencial de aquecimento global foi determinado utilizando um fator de emissão de 0,3556 kgCO₂-eq por kWh, obtido como média das regiões ERCT, SRMV e SPSO no eGRID 2023 publicado em United States Environmental Protection Agency (2025). Para viabilizar comparações, foram utilizadas funções objetivo específicas, normalizadas pela vazão mássica de GNL produzida em um ano ($\dot{m}_{LNG}t_{ano}$),

$$f_1 = \frac{TAC(\vec{x}, T)}{\dot{m}_{LNG}(\vec{x}, T)t_{ano}} \quad (5)$$

$$f_2 = \frac{I_{MC}(\vec{x}, T)}{\dot{m}_{LNG}(\vec{x}, T)t_{ano}} \quad (6)$$

onde, I_{MC} é indicador de potencial de aquecimento global (kgCO₂-eq/ano) e t_{ano} é o tempo de operação da planta em um ano que é de 8000 h/ano.

A factibilidade foi definida por restrições operacionais associadas à integridade térmica e à condição de fase na alimentação dos compressores. Na condição nominal, impôs-se um *minimum internal temperature approach* (MITA) maior ou igual a três e sob incertezas adotou que deve ser maior que zero em todos os cenários. Além disso, exigiu-se que a fração de vapor na alimentação dos compressores seja sempre um. Se uma restrição é violada ou se a convergência do simulador falha, a solução é considerada infactível. Uma penalização exponencial foi implementada (Equação 7) para lidar com as violações de restrição.

$$f_m' = \begin{cases} f_m, & \text{se factível} \\ f_m \left(\alpha + e^{\sum_{j=1}^{n_g} \max\{0, g_j\}} \right), & \text{se infactível} \end{cases} \quad m \in \{1, 2\} \quad (7)$$

em que α é uma constante, n_g o número de restrições e g_j é o valor da restrição j .

Com base nas definições anteriores, a otimização determinística foi formulada como:

$$\begin{aligned} \text{Min } \vec{F}(\vec{x}, T_0) &= [f_1'(\vec{x}, T_0), f_2'(\vec{x}, T_0)] \\ \text{s. a. } &\begin{cases} \text{MITA}(\vec{x}, T_0) \geq 3 \\ \text{VAPOR}(\vec{x}, T_0) \geq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (8)$$

e a otimização robusta foi formulada pela minimização das funções efetivas (Equações 9 e 10).

$$f_m^{eff}(\vec{x}) = \frac{1}{n_k} \sum_{k=1}^{n_k} f'_m(\vec{x}, T^k), \quad m \in \{1,2\} \quad (9)$$

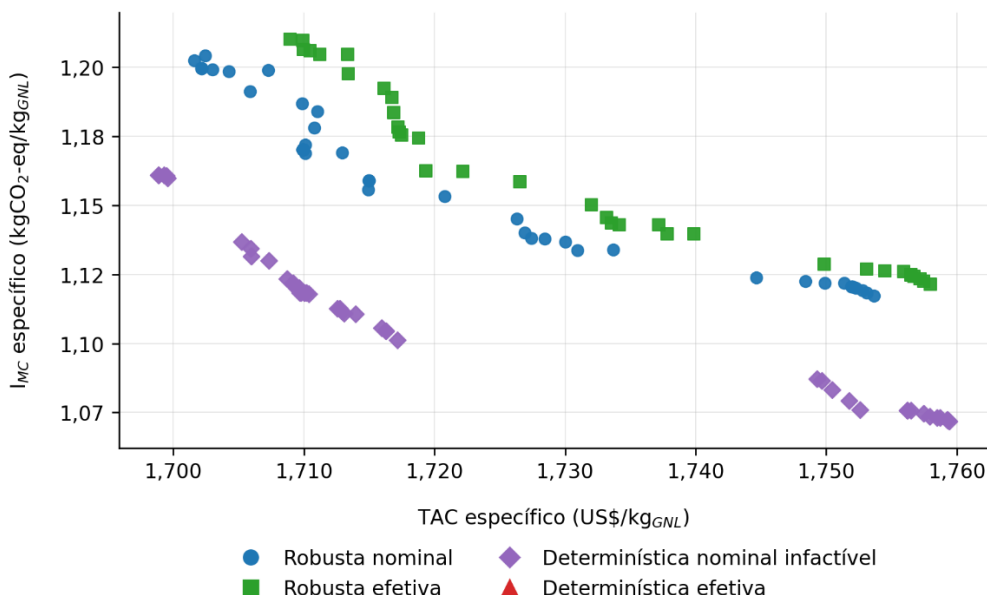
$$\begin{aligned} \text{Min } \vec{F}^{eff}(\vec{x}) &= [f_1^{eff}(\vec{x}), f_2^{eff}(\vec{x})] \\ \text{s.a. } &\begin{cases} MITA(\vec{x}, T^k) > 0, & k = 1, \dots, n_k \\ VAPOR(\vec{x}, T^k) \geq 1, & k = 1, \dots, n_k \\ MITA(\vec{x}, T_0) \geq 3 \text{ }^\circ\text{C} \\ VAPOR(\vec{x}, T_0) \geq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (10)$$

3. Resultados e discussões

A Figura 3 apresenta as respostas nominais e efetivas dos conjuntos obtidos por otimização robusta e determinística utilizando 60 partículas e 100 iterações. As soluções robustas na condição nominal (círculos azuis) correspondem às soluções resultantes da formulação robusta avaliadas em T_0 , enquanto as soluções robustas efetivas (quadrados verdes) representam as respostas médias dessas mesmas soluções quando avaliadas sob os 30 cenários de temperatura. Assim, observa-se um deslocamento entre as respostas nominais e efetivas, refletindo a degradação média de desempenho quando a variabilidade na temperatura ambiente é incorporada explicitamente na avaliação.

No caso determinístico, as soluções determinísticas na condição nominal (losangos roxos) exibem, como esperado, melhor desempenho quando avaliadas apenas em T_0 , podendo apresentar dominância em relação ao conjunto robusto. Entretanto, ao avaliar essas mesmas soluções nos 30 cenários de incerteza, nenhuma permaneceu factível (isto é, todas violaram ao menos uma restrição e/ou não permitiram a convergência em algum cenário), portanto não há pontos (triângulos vermelhos) para apresentar na Figura 3. Assim, embora o conjunto determinístico seja atrativo nominalmente, sua operação torna-se potencialmente inviável sob variações realistas de temperatura do ar, ao passo que o conjunto robusto mantém soluções operáveis e com desempenho efetivo quantificável.

Figura 3. Fronteiras de Pareto na condição nominal (T_0) e efetiva (média em 30 cenários) para otimização robusta e determinística



4. Conclusão

Este trabalho evidencia que a avaliação estritamente determinística pode superestimar a qualidade de soluções de otimização para o processo SMR. Embora o conjunto determinístico apresente melhor desempenho na condição nominal, a reavaliação sob cenários realistas de temperatura do ar demonstrou perda completa de factibilidade dessas soluções, seja por violação de restrição ou por falha de convergência. Em contraste, a

formulação robusta produziu soluções com desempenho nominal inferior, porém com respostas operacionalmente efetivas. Esses resultados reforçam que a robustez deve ser incorporada como critério explícito na determinação de condições ótimas de projeto em plantas de liquefação de gás natural.

A análise separou a etapa de projeto da etapa de operação por meio da fixação do dimensionamento do projeto para depois avaliar as incertezas, porém o estudo considerou apenas uma única incerteza, na temperatura do ar, e foi realizada apenas no processo SMR. Trabalhos futuros podem ampliar a abordagem para considerar simultaneamente múltiplas fontes de incerteza e trabalhar com diferentes processos para permitir comparações. Além disso, também pode ser possível investigar estratégias de *recourse* ou controle das variáveis de operação para tentar recuperar factibilidade sem penalizar excessivamente o desempenho médio.

Agradecimentos: Os autores agradecem o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq – Brasil, processo 307705/2025-0. Ainda, o presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001 e processos 88887.986456/2024-00 e 88887.083935/2024-00.

Referências

- Coello, C. A. C., & Reyes-Sierra, M. (2006). Multi-Objective Particle Swarm Optimizers: A Survey of the State-of-the-Art. *International Journal of Computational Intelligence Research*, 2(3), 287-308. <https://doi.org/10.5019/j.ijcir.2006.68>
- Eberhart, R., & Kennedy, J. (1995). A new optimizer using particle swarm theory. *MHS'95. Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science*, 39–43. <https://doi.org/10.1109/MHS.1995.494215>
- EIA. (2024, 16 de abril). *Natural gas explained - Natural gas and the environment*. eia.gov. <https://www.eia.gov/energyexplained/natural-gas/natural-gas-and-the-environment.php>
- Furda, P., Polakovičová, D., Myšiak, J., & Variny, M. (2025). C3MR LNG process design: Novel approach to optimization for feedstock variability and multi-criteria analysis including economics, safety and environmental impact. *Energy*, 322, 135194. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.135194>
- ICF. (2024, 30 de Julho). *Lifecycle GHG Emissions of US LNG Exports: Concepts, Methodologies, Data and Results*. Natural Allies for a Clean Energy Future (NACEF); Partnership to Address Global Emissions (PAGE). <https://www.naturalalliesforcleanenergy.org/wp-content/uploads/2024/07/NACEF-LNG-Exports.pdf>
- IEA. (2024). *Gas Market Report, Q1-2024*. <https://www.iea.org/reports/gas-market-report-q1-2024>
- Molnar, G. (2022). Economics of Gas Transportation by Pipeline and LNG. Em G. Hafner Manfred and Luciani (Org.), *The Palgrave Handbook of International Energy Economics* (p. 23–57). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-86884-0_2
- Mortazavi, A., Alabdulkarem, A., Hwang, Y., & Radermacher, R. (2016). Development of a robust refrigerant mixture for liquefaction of highly uncertain natural gas compositions. *Energy*, 113, 1042–1050. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2016.07.147>
- Mukherjee, M., Littlefield, J., Khutal, H., Kirchner-Ortiz, K. M., Davis, K. G., Jing, L., Ramadan, F., El-Houjeiri, H., Masnadi, M. S., & Brandt, A. R. (2025). Greenhouse gas emissions from the US liquefied natural gas operations and shipping through process model based life cycle assessment. *Communications Earth & Environment*, 6(1), 16. <https://doi.org/10.1038/s43247-024-01988-2>
- Pereira, M. A. M., Santos, L. F., Caballero, J. A., Ravagnani, M. A. S. S., & Costa, C. B. B. (2022). Energy and economic comparison of five mixed-refrigerant natural gas liquefaction processes. *Energy Conversion and Management*, 272, 116364. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.116364>
- Qyyum, M. A., Qadeer, K., & Lee, M. (2018). Comprehensive Review of the Design Optimization of Natural Gas Liquefaction Processes: Current Status and Perspectives. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 57(17), 5819–5844. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b03630>
- Tsay, C., & Baldea, M. (2018). Scenario-Free Optimal Design under Uncertainty of the PRICO Natural Gas Liquefaction Process. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 57(17), 5868–5880. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b03634>
- Tukey, J. W. (1977). *Exploratory Data Analysis*. Addison-Wesley.
- Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., & Shaeiwitz, J. A. (2008). *Analysis, synthesis and design of chemical processes - Third edition*. Pearson Education.
- United States Environmental Protection Agency. (2025, 27 de março). *eGRID Summary Tables 2023*. https://www.epa.gov/system/files/documents/2025-06/summary_tables_rev2.pdf