

Integração DWSIM-Python para a Simulação e Otimização de uma Planta de Processamento de Gás Natural

Gabriel Freitas Ferraz^a, Roymel Rodríguez Carpio^{a*}, Nicolas Spogis^b

^a Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

^b Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas-SP, Brasil

*roymel@eq.ufrj.br

RESUMO

Unidades de Processamento de Gás Natural (UPGNs) realizam o condicionamento e o fracionamento do gás natural, gerando correntes de maior valor agregado, como Gás de Venda (GV), Gás Liquefeito de Petróleo (GLP) e Gasolina Natural (GN). Devido à volatilidade dos preços desses produtos, a hierarquia de rentabilidade entre eles pode se alterar ao longo do tempo, levando a planta a operar em condições potencialmente subótimas. Este trabalho apresenta um *framework* ágil e robusto para a otimização de parâmetros operacionais, com o objetivo de maximizar a receita em resposta às condições de mercado vigentes, respeitando as limitações estruturais da planta e as especificações de qualidade/segurança dos produtos. O *framework* proposto é inteiramente baseado em ferramentas *open-source*, integrando a simulação rigorosa do DWSIM ao ecossistema de computação científica em Python. O DWSIM é empregado para a simulação do processo, enquanto o algoritmo *Sequential Least Squares Programming* (SLSQP), implementado na biblioteca SciPy, é utilizado para resolver o problema de otimização não linear com restrições. Os resultados obtidos para três cenários econômicos distintos demonstram a robustez e a capacidade de resposta do *framework* em tempo computacional viável, evidenciando um potencial de aumento de receita de até 8%, dependendo do grau de afastamento das condições operacionais em relação ao ponto ótimo.

Palavras-chave: Gás natural; Otimização; DWSIM; Python.

1. Motivação

As Unidades de Processamento de Gás Natural (UPGNs) recebem o gás bruto proveniente das plataformas de extração para condicionamento e fracionamento em correntes de alto valor agregado que são vendidas como produtos, notadamente: Gás de Venda (GV), Gás Liquefeito de Petróleo (GLP) e Gasolina Natural (GN). Dada a volatilidade do mercado de hidrocarbonetos, a dinâmica oscilatória dos preços de venda pode alterar a hierarquia de rentabilidade entre esses produtos. Essa instabilidade comercial, aliada à flexibilidade operacional de priorizar determinadas frações, frequentemente resulta em condições operacionais subótimas. Nesse cenário, torna-se crucial a implementação de um *framework* ágil e robusto que viabilize a otimização dos parâmetros de processo, visando à maximização da receita em resposta às condições vigentes de mercado (Souza et al., 2023).

A otimização de UPGNs tem sido amplamente explorada na literatura sob diferentes abordagens. Bullin e Chipps (2005) estabeleceram uma base prática ao integrarem o simulador ProMax a planilhas eletrônicas para a otimização econômica frente a variações na carga de alimentação. Evoluindo para o monitoramento em tempo real, Campos et al. (2012) utilizaram o HYSYS para modelar a planta e otimizar a operação considerando a volatilidade simultânea das condições do gás de entrada e dos preços de mercado. No âmbito do planejamento estratégico, Al-Sobhi e Elkamel (2015) empregaram o Aspen Plus para gerar coeficientes de rendimento em uma otimização linear voltada à distribuição de gás em redes de processamento. Mais recentemente, Souza et al. (2023) aplicaram otimização não linear no HYSYS para a alocação de carga entre múltiplas unidades. Por último, Carpio et al. (2024) propuseram uma abordagem híbrida, utilizando modelos substitutos para a busca global e simulação rigorosa em HYSYS para o refinamento local, visando à maximização da receita.

Contudo, observa-se uma lacuna na literatura quanto ao emprego de simuladores não proprietários e de código aberto para tais finalidades. O presente trabalho preenche essa lacuna ao propor um *framework* de otimização econômica para UPGNs baseado integralmente em ferramentas *open-source*, integrando a simulação rigorosa do DWSIM ao ecossistema de computação científica do Python. Para além da viabilidade financeira proporcionada pela eliminação de custos com licenciamento, a relevância desta abordagem reside na soberania tecnológica e na flexibilidade metodológica que o uso de ferramentas abertas oferece à engenharia de processos.

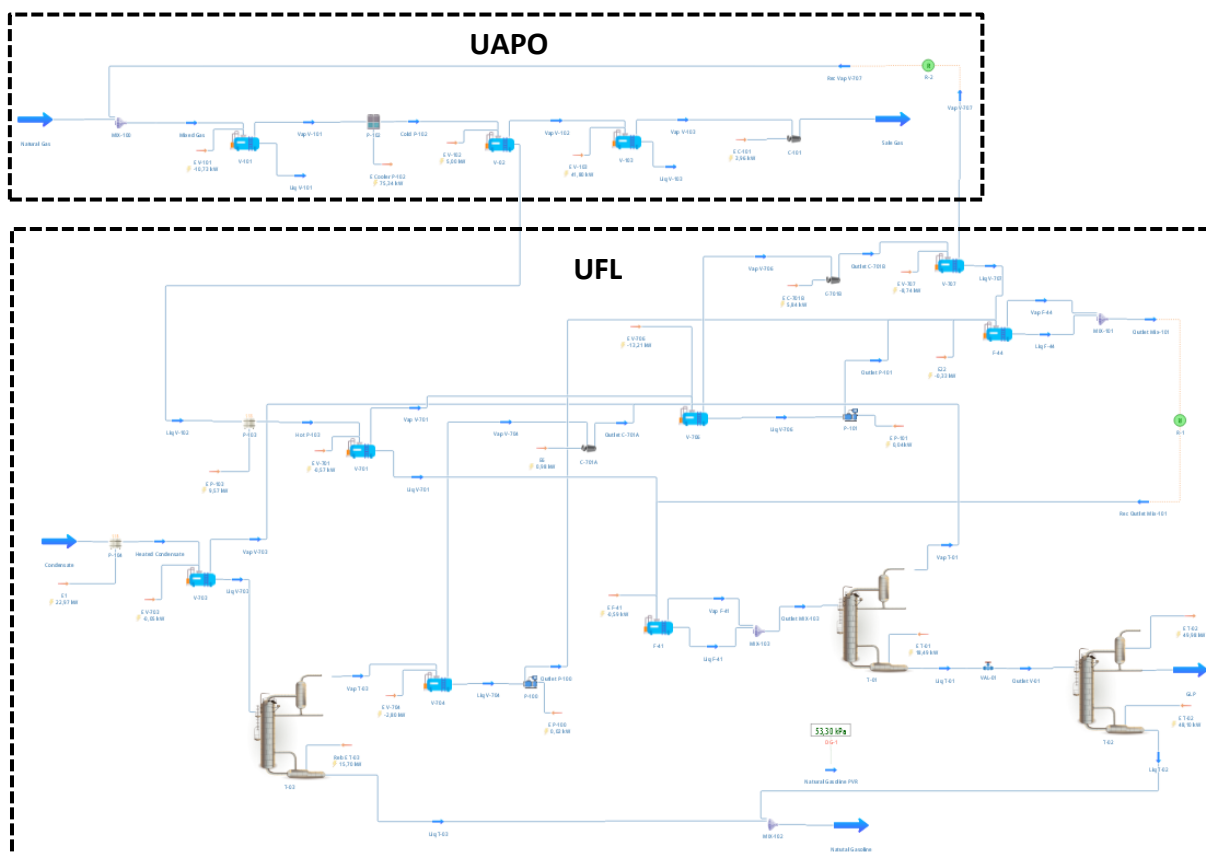
2. Metodologia

2.1. Descrição do processo e simulação em DWSIM

A UPGN objeto de estudo foi simulada utilizando o simulador Open-Source DWSIM (Medeiros, 2024). O modelo de simulação compreende duas unidades de processamento altamente integradas: uma Unidade de Ajuste de Ponto de Orvalho (UAPO), que processa a fase vapor proveniente dos coletores de gás, e uma Unidade de Fracionamento de Líquidos (UFL), responsável pelo tratamento do condensado. Essas unidades estão estreitamente integradas por correntes de reciclo de material. Especificamente, a corrente de condensados da UAPO é encaminhada à UFL, enquanto o gás de reciclo da UFL retorna à UAPO. A missão da UAPO é especificar o produto Gás de Venda (composto maioritariamente por metano). Já a UFL permite especificar os produtos líquidos: Gás Liquefeito de Petróleo (uma mistura de propanos e butanos) e Gasolina Natural (uma corrente composta por componentes mais pesados que o C₄).

O fluxograma completo do processo é apresentado na Figura 1, e inclui os seguintes módulos/equipamentos: separadores gás-líquido (separador flash); compressores; trocadores de calor; bombas; blocos de reciclo; e três colunas de destilação: uma desetanizadora (T-01), uma desbutanizadora (T-02) e uma estabilizadora (T-03). Unidades auxiliares, como o ciclo de refrigeração a propano, foram deliberadamente excluídas da simulação, uma vez que o objetivo deste estudo é a otimização da planta como um todo. Consequentemente, as limitações dessas unidades auxiliares foram consideradas como restrições operacionais no problema de otimização.

Figura 1. Fluxograma do processo em DWSIM com as duas unidades de processamento: UAPO e UFL.



Foram considerados ao todo 16 componentes, incluindo: nitrogênio, dióxido de carbono e hidrocarbonetos do metano ao dodecano. Assim, a equação de estado de Peng–Robinson (Peng e Robinson, 1976) foi selecionada como o modelo termodinâmico, sendo adequada para sistemas dominados por hidrocarbonetos a pressões moderadas. Para as especificações das condições da corrente de gás e da corrente de condensados que alimentam o processo, assim como dos parâmetros de operação e o valor das variáveis de decisão no caso base, foram utilizados os valores típicos de Carpio et al. (2024).

2.2. Formulação do problema de otimização

Após uma etapa de triagem preliminar, voltada à identificação de variáveis controladas com flexibilidade de ajustes no *setpoints*, e uma análise de sensibilidade local para mapear os parâmetros operacionais de maior impacto, selecionaram-se cinco variáveis operacionais como variáveis de decisão para o problema de otimização. Além do estabelecimento dos limites operacionais para as variáveis de decisão, foram consideradas quatro restrições de qualidade/segurança relativas aos diferentes produtos. As informações sobre as variáveis de decisão e as restrições de desigualdade são detalhadas nas Tabelas 1 e 2, respectivamente. Ressalta-se que as restrições de igualdade — que compreendem os balanços de massa, energia e relações constitutivas — são intrinsecamente satisfeitas pela convergência da simulação no DWSIM.

Tabela 1. Variáveis de decisão do problema de otimização.

Código	Descrição	U/M	Limite inferior	Caso base	Limite superior
V-02_T	Temp. do vaso separador V-02 (separador da UAPO)	°C	-33	-20	-17
T-01_T	Temp. de fundo da coluna T-01 (desetanizadora)	°C	51	76	94
T-02_RR	Razão de refluxo da coluna T-02 (desbutanizadora)	-	0,7	1,5	4,5
T-02_T	Temp. de fundo da coluna T-02 (desbutanizadora)	°C	107	149	183
T-03_T	Temp. de fundo da coluna T-03 (estabilizadora)	°C	152	177	206

Tabela 2. Restrições de desigualdade do problema de otimização.

Código	Descrição	U/M	Limite	Caso base
GV_C1	Teor de metano no GV	% molar	≥ 80	81,50
GLP_C2	Teor de etano no GLP	% molar	≤ 12	8,75
GLP_C5	Teor de C ₅₊ no GLP	% molar	≤ 2	0,76
GN_PVR	Pressão de Vapor Reid da GN	kPa	≤ 76	53,34

O objetivo da otimização é maximizar a receita da planta obtida a partir da venda dos diferentes produtos. Sendo assim, como Função Objetivo (FO) a ser maximizada foi escolhido o percentual de aumento da receita em relação à receita obtida nas condições do caso base conforme a Equação 1, sendo a Receita calculada segundo a Equação 2.

$$FO = 100 \frac{Receita - Receita_{Base}}{Receita_{Base}} \quad (1)$$

$$Receita = P_{GV} PCI_{GV} + P_{GLP} PCI_{GLP} + P_{GN} PCI_{GN} \quad (2)$$

Para avaliar a capacidade de resposta do *framework* de otimização ante diferentes condições de mercado, foram utilizados 3 cenários econômicos diferentes, conforme detalhado na Tabela 3.

Tabela 3. Cenários econômicos.

Cenário	Descrição	Preços (\$/MMbtu)		
		GV	GLP	GN
1	Priorização do GV	15	10	5
2	Priorização do GLP	5	15	10
3	Priorização da GN	5	10	15

Como trata-se de um problema de otimização não linear com restrições, o algoritmo *Sequential Least Squares Programming* (SLSQP) (Kraft, 1988), implementado na biblioteca *SciPy* (Virtanen et al., 2020), foi empregado, considerando as quatro restrições de qualidade/segurança de produto formuladas como restrições de desigualdade não lineares. O otimizador foi configurado com um tamanho de passo de 0,5 e uma tolerância de função de 10^{-2} . Cada solução candidata foi avaliada diretamente pelo modelo de simulação do DWSIM através de sua interface de automação Python/COM, garantindo uma avaliação do processo de alta fidelidade em vez de uma aproximação por modelos substitutos.

3. Resultados

3.1. Resultados da otimização para o Cenário 1

Neste cenário, o algoritmo atingiu a convergência após 9 iterações e 54 chamadas à simulação no DWSIM, resultando em um tempo computacional aproximado de 346 segundos. A Tabela 4 apresenta os resultados da otimização para o Cenário 1, que considera a seguinte ordem de valorização dos produtos: GV > GLP > GN.

Tabela 4. Resultados da otimização para o Cenário 1.

Código	Tipo de variável	U/M	Limite inferior	Base	Ótimo	Limite Superior	Observação
V-02 T	Decisão	°C	-33,00	-20,00	-17,00	-17,00	Limite superior
T-01 T	Decisão	°C	51,00	76,00	91,04	94,00	Aumentou
T-02 RR	Decisão	-	0,70	1,50	4,23	4,50	Aumentou
T-02 T	Decisão	°C	107,00	149,00	150,29	183,00	Variou pouco
T-03 T	Decisão	°C	152,00	177,00	177,07	206,00	Variou pouco
FO	Objetivo	%	-	0,00	0,63	-	Aumentou
GV C1	Restrição	% molar	80,00	81,50	80,75	-	Diminuiu
GLP C2	Restrição	% molar	-	8,75	0,83	12,00	Diminuiu
GLP C5	Restrição	% molar	-	0,76	2,00	2,00	Limite superior
GN PVR	Restrição	kPa	-	53,34	50,43	76,00	Diminuiu

Observa-se que a variável de decisão V-02_T atingiu seu valor máximo, o que favorece a incorporação de uma maior quantidade de componentes pesados à corrente de produto de GV. Esse comportamento é corroborado pela redução do teor de metano no GV, que se aproxima de seu limite inferior. Outro fator que contribui para a priorização da corrente de GV é o aumento da temperatura de fundo da desetanizadora (T-01_T). Nessas condições, uma maior fração de etano retorna à UAPO na corrente de gás de reciclo, sendo posteriormente incorporada ao GV. Esse efeito é evidenciado pela diminuição do teor de etano no GLP. De forma geral, essas alterações nas condições operacionais favorecem o aumento da vazão da corrente de GV, que constitui o produto mais valorizado neste cenário.

No que diz respeito ao trade-off entre GLP e GN, observa-se que a corrente de GLP passou a incorporar a maior quantidade possível de componentes pesados, atingindo o limite da restrição associada à variável GLP_C5. Isso indica uma priorização do GLP em detrimento do GN. Por fim, o aumento discreto da receita sugere que o caso base já se encontrava próximo das condições operacionais ótimas para este cenário comercial.

3.2. Resultados da otimização para o Cenário 2

Para o Cenário 2, o algoritmo atingiu a convergência após 6 iterações e 38 chamadas à simulação no DWSIM, resultando em um tempo computacional aproximado de 301 segundos. A Tabela 5 apresenta os resultados da otimização para este cenário, que considera a seguinte ordem de valorização dos produtos: GLP > GN > GV.

Tabela 5. Resultados da otimização para o Cenário 2.

Código	Tipo de variável	U/M	Limite inferior	Base	Ótimo	Limite Superior	Observação
V-02 T	Decisão	°C	-33,00	-20,00	-33,00	-17,00	Limite inferior
T-01 T	Decisão	°C	51,00	76,00	64,79	94,00	Diminuiu
T-02 RR	Decisão	-	0,70	1,50	1,18	4,50	Diminuiu
T-02 T	Decisão	°C	107,00	149,00	151,48	183,00	Variou pouco
T-03 T	Decisão	°C	152,00	177,00	187,59	206,00	Aumentou
FO	Objetivo	%	-	0,00	8,03	-	Aumentou
GV C1	Restrição	% molar	80,00	81,50	83,78	-	Aumentou
GLP C2	Restrição	% molar	-	8,75	12,00	12,00	Limite superior
GLP C5	Restrição	% molar	-	0,76	2,00	2,00	Limite superior
GN PVR	Restrição	kPa	-	53,34	48,76	76,00	Diminuiu

Neste caso, a variável de decisão V-02_T atingiu seu valor mínimo, o que favorece a recuperação de uma maior quantidade de componentes pesados na corrente de condensados encaminhada à UFL. Esse comportamento

é corroborado pelo aumento do teor de metano no GV, indicando uma menor presença de componentes pesados nessa corrente. Outro fator que contribui para a priorização do GLP é a redução da temperatura de fundo da desetanizadora (T-01_T), que permite que uma fração maior de etano seja encaminhada à desbutanizadora (T-02), responsável pela produção de GLP no topo. Esse efeito é evidenciado pelo aumento do teor de etano no GLP, que atinge seu limite superior. O mesmo ocorre com o teor de C₅₊ no GLP, que também é elevado até seu valor máximo permitido.

De forma geral, as alterações nas condições operacionais favorecem, em primeiro lugar, o aumento da vazão da corrente de GLP e, em segundo, da corrente de GN, em detrimento da vazão do produto GV. Um aumento expressivo da receita (8,03%) é alcançado, sugerindo que o caso base está bem afastado das condições operacionais ótimas para este cenário comercial.

3.3. Resultados da otimização para o Cenário 3

Para este cenário, o algoritmo atingiu a convergência após 10 iterações e 62 chamadas à simulação no DWSIM, resultando em um tempo computacional aproximado de 492 segundos. Os resultados da otimização para o Cenário 3 — no qual o GN é considerado o produto mais valioso, seguido do GLP e, por último, do GV — são apresentados na Tabela 6.

Tabela 6. Resultados da otimização para o Cenário 3.

Código	Tipo de variável	U/M	Limite inferior	Base	Ótimo	Limite Superior	Observação
V-02 T	Decisão	°C	-33,00	-20,00	-33,00	-17,00	Limite inferior
T-01 T	Decisão	°C	51,00	76,00	65,20	94,00	Diminuiu
T-02 RR	Decisão	-	0,70	1,50	2,81	4,50	Aumentou
T-02 T	Decisão	°C	107,00	149,00	137,67	183,00	Diminuiu
T-03 T	Decisão	°C	152,00	177,00	181,60	206,00	Aumentou
FO	Objetivo	%	-	0,00	4,25	-	Aumentou
GV C1	Restrição	% molar	80,00	81,50	83,74	-	Aumentou
GLP C2	Restrição	% molar	-	8,75	12,00	12,00	Limite superior
GLP C5	Restrição	% molar	-	0,76	0,01	2,00	Diminuiu
GN PVR	Restrição	kPa	-	53,34	76,00	76,00	Limite superior

De forma semelhante ao Cenário 2, a variável de decisão V-02_T atingiu seu valor mínimo, favorecendo a recuperação de componentes pesados que são encaminhados à UFL na corrente de condensados. Esse comportamento é confirmado pelo aumento do teor de metano no GV, indicando uma menor presença de componentes pesados nessa corrente. Com essa decisão, o algoritmo passa a priorizar a produção de líquidos de forma geral.

A priorização da GN em relação ao GLP é evidenciada pelo fato da restrição de pressão de vapor da GN (GN_PVR) encontrar-se em seu limite superior, indicando que a maior quantidade possível de componentes leves foi incorporada à corrente de GN. Esse efeito é corroborado pela redução do teor de componentes pesados no GLP (GLP_C5). Por outro lado, o GLP passa a incorporar a maior quantidade possível de etano (GLP_C2 atinge seu limite superior), evidenciando sua priorização em relação ao GV, efeito favorecido pela diminuição da temperatura de fundo da desetanizadora (T-01_T).

Observa-se, portanto, que o algoritmo, para este cenário, identificou condições operacionais que maximizam a produção dos produtos mais valorizados, em consonância com os preços estabelecidos. A receita apresentou um aumento intermediário (4,25%) em comparação aos dois cenários anteriores, representando um ganho significativo decorrente da aplicação da otimização.

4. Conclusão

O *framework* de otimização desenvolvido apresentou desempenho satisfatório na resolução de três cenários econômicos distintos, sendo capaz de identificar as condições operacionais que maximizam a receita proveniente da venda dos produtos em tempos computacionais da ordem de 5 a 8 minutos, resultando em ganhos incrementais de até 8%.

Os parâmetros operacionais que maximizam a receita conduzem, de forma recorrente, a condições em que pelo menos uma — e, em alguns casos, duas — restrições de qualidade ou segurança são atingidas em seus limites. Considerando que a planta deve operar com margens de segurança adequadas, os ganhos práticos decorrentes da aplicação do *framework* tendem a ser inferiores aos estimados neste estudo, ainda que permaneçam significativos.

Nomenclatura

Elemento	Descrição	U/M
FO	Função Objetivo	%
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo	-
GLP_C2	Teor de etano no GLP	% molar
GLP_C5	Teor de C5+ no GLP	% molar
GN	Gasolina Natural	-
GN_PVR	Pressão de Vapor Reid da GN	kPa
GV	Gás de Venda	-
GV_C1	Teor de metano no GV	% molar
PCI_{GN}	Poder Calorífico Inferior da corrente de GN	MMbtu/h
PCI_{GLP}	Poder Calorífico Inferior da corrente de GLP	MMbtu/h
PCI_{GV}	Poder Calorífico Inferior da corrente de GV	MMbtu/h
P_{GN}	Preço de venda da GN	\$/MMbtu
P_{GLP}	Preço de venda do GLP	\$/MMbtu
P_{GV}	Preço de venda do GV	\$/MMbtu
PVR	Pressão de Vapor Reid	-
T-02_RR	Razão de refluxo da coluna T-02 (desbutanizadora)	-
T-01_T	Temp. de fundo da coluna T-01 (desetanizadora)	°C
T-02_T	Temp. de fundo da coluna T-02 (desbutanizadora)	°C
T-03_T	Temp. de fundo da coluna T-03 (estabilizadora)	°C
UAPO	Unidade de Ajuste de Ponto de Orvalho	-
UFL	Unidade de Fracionamento de Líquidos	-
UPGN	Unidades de Processamento de Gás Natural	-
V-02_T	Temp. do vaso separador V-02 (separador da UAPO)	°C

Agradecimentos: Os autores agradecem AI4Tech (<https://ai4tech.ai/>) pela infraestrutura computacional oferecida; à comunidade de desenvolvimento do simulador DWSIM por disponibilizar esta ferramenta *open-source*; e o apoio financeiro da FAPERJ – Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro.

Referências

- Al-Sobhi, S.A.; Elkamel, A. “Simulation and optimization of natural gas processing and production network consisting of LNG, GTL, and methanol facilities”. *J. Nat. Gas Sci. Eng.*, 23, 500–508, 2015.
- Bullin, K.A.; Chipps, J. “Optimization of natural gas gathering systems and gas plants”. In: *Proceedings of the GPA Annual Convention Proceedings*. ISSN: 00968870, 2005.
- Campos, M.; Gomes, M.; Souza, A.; Barros, A. “Optimisation of natural gas plant – Gains in profitability, stability and energy efficiency”. In: *Proceedings of the International Gas Union World Gas Conference Papers*, 3, 2089–2120, 2012.
- Carpio, R.R., Paiva, C.R., Guedes, T.A.L., Pinho, B.V., Souza, T.E.G., Santos, L.C., Ribeiro, L.D., Secchi, A. R. “Hybrid Optimization Strategy Applied to an Industrial Natural Gas Processing Plant”. *Comp. Aided Chem. Eng.*, 53, 3229–3234, 2024.
- Medeiros, D.W. “DWSIM – Open-Source Chemical Process Simulator, version 9.0”. <https://dwsim.org/>, 2024.
- Kraft, D. “A Software Package for Sequential Quadratic Programming”. DFVLR-FB 88-28, Köln, 1988.
- Peng, D.-Y., Robinson, D.B. “A new two-constant equation of state”. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15(1), 59–64, 1976.
- Souza, T.E.G., Secchi, A.R., Santos, L.C. “Modeling and economic optimization of an industrial site for natural gas processing: A nonlinear optimization approach”. *Digit. Chem. Eng.*, 6, 100070, 2023.
- Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T.E. “SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python”. *Nat. Methods*, 17, 261–272, 2020.