

# Análise de operabilidade de destilação extrativa de etanol anidro via gêmeo digital baseado em DWSIM

Isabela Dalmolin Battistella<sup>a</sup>, Luellen Pereira Rocha<sup>b</sup>, Rebeca Albino De Jesus<sup>b</sup>, Heleno Bispo<sup>b</sup>,  
Nicolas Spogis<sup>c\*</sup>

<sup>a</sup> Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Florianópolis-SC, Brasil

<sup>b</sup> Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), Campina Grande-PB, Brasil

<sup>c</sup> Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brasil

\* [nicolas.spogis@ai4tech.ai](mailto:nicolas.spogis@ai4tech.ai)

## RESUMO

Este trabalho apresenta uma análise de operabilidade para um sistema de destilação extrativa de etanol anidro utilizando um gêmeo digital baseado no simulador *open-source* DWSIM. Um planejamento de experimentos (DOE) via *Latin Hypercube Sampling* com 5.000 cenários foi conduzido, variando quatro parâmetros operacionais: razão solvente/alimentação, vazão volumétrica, temperatura e composição da alimentação. Os resultados revelam que 1,98% do espaço operacional atinge a especificação de pureza de 99,5%, e o índice de operabilidade combinado (pureza + perda + energia) é de apenas 0,28% no cenário mais estrito. Um *soft sensor* multivariável baseado na temperatura de estágio sensível, razão de refluxo, composição da alimentação e razão solvente/alimentação alcançou  $R^2 = 0,857$ , viabilizando estimativa contínua de pureza sem analisador em linha. A análise de Pareto identificou condições ótimas que conciliam pureza e eficiência energética com economia de até 12% no consumo. Dessa forma, estudo evidencia que a análise de operabilidade integrada a gêmeos digitais constitui uma abordagem promissora para redefinir estratégias de controle e otimização em processos de separação complexos.

**Palavras-chave:** Gêmeo digital; Destilação extrativa; Operabilidade; Etanol anidro; DWSIM.

## 1. Introdução

A produção de etanol anidro por destilação extrativa é um importante processo na cadeia do bioetanol combustível, porém caracterizado por uma janela operacional estreita e elevada sensibilidade a variações de processo. A separação do azeótropo etanol-água requer a adição de um solvente, tipicamente etilenoglicol, que modifica a volatilidade relativa e permite a obtenção de etanol com pureza superior a 99,5% em massa (Gil et al., 2012; Jaime et al., 2023). No entanto, a janela operacional que garante simultaneamente a especificação de pureza, baixo consumo energético e minimização de perdas é notoriamente estreita, tornando a operação manual altamente desafiadora.

O conceito de gêmeo digital (Digital Twin, DT) tem ganhado destaque na engenharia de processos como uma representação virtual de um sistema físico capaz de reproduzir seu comportamento e apoiar monitoramento, previsão e otimização operacional em tempo real (Udugama et al., 2024; Zhang et al., 2024). Aplicações de DT em colunas de destilação têm demonstrado potencial para controle avançado, treinamento de operadores e otimização energética (Kender et al., 2021; Kang et al., 2023). Contudo, a literatura carece de estudos que quantifiquem formalmente a operabilidade de sistemas de destilação extrativa sob a ótica de gêmeos digitais.

A análise de operabilidade, formalizada por Vinson e Georgakis (2000) e estendida por Georgakis et al. (2003), provê métricas quantitativas para avaliar a capacidade inerente de um processo atingir as especificações desejadas com as variáveis manipuladas disponíveis. Trabalhos recentes (Gazzaneo et al., 2020; Alves e Lima, 2024) expandiram o framework para sistemas não-quadrados e seleção de estruturas de controle. A integração deste framework com simuladores *open-source* como o DWSIM (Medeiros, 2023) oferece uma plataforma acessível e reprodutível para implementação de gêmeos digitais.

Diante desse cenário, este trabalho tem como objetivo quantificar a operabilidade de um sistema de destilação extrativa de etanol anidro utilizando um gêmeo digital baseado em DWSIM, através de um DOE com 5.000 cenários. As contribuições incluem: (i) cálculo de índices de operabilidade combinados; (ii) desenvolvimento de um *soft sensor* multivariável para estimativa de pureza; e (iii) identificação da fronteira de Pareto pureza-energia para otimização em tempo real.

## 2. Metodologia

### 2.1. Configuração da simulação

O sistema simulado consiste em uma coluna de destilação extrativa para separação do azeótropo etanol-água utilizando etilenoglicol como solvente, implementada no simulador DWSIM v9.0.5 (Medeiros, 2025). O DWSIM é um simulador de processos químicos *open-source*, compatível com CAPE-OPEN, que oferece modelos termodinâmicos rigorosos comparáveis a simuladores comerciais. A coluna foi configurada com modelo de estágios de equilíbrio, incluindo condensador total e refeedor parcial.

### 2.2. Planejamento de experimentos

Um DOE via Latin Hypercube Sampling (LHS) foi conduzido com 5.000 cenários, variando simultaneamente seis parâmetros de entrada conforme a Tabela 1. Todas as 5.000 simulações convergiram sem valores ausentes, indicando robustez numérica do modelo.

**Tabela 1.** Fatores do DOE e suas faixas de variação.

Variável	Mínimo	Máximo
Razão S/F	0,4	1,2
Vazão volumétrica (m <sup>3</sup> /h)	3,0	7,0
Temperatura da alimentação (°C)	30,0	40,0
Fração mássica EtOH na alimentação	0,85	0,93
Fração Mássica de Etanol no Etanol Anidro	0,98	0,999
Fração Mássica de Etanol no Fundo	1e <sup>-4</sup>	3e <sup>-4</sup>

### 2.3. Framework de operabilidade

A análise segue o framework de Vinson e Georgakis (2000), onde o Índice de Operabilidade (*Operability Index*, OI) é definido como a fração do Conjunto de Saída Desejado (*Desired Output Set*, DOS) alcançável pelo Conjunto de Entrada Disponível (*Achievable Input Set*, AIS). O DOS é definido por múltiplas especificações simultâneas: pureza do etanol anidro, perda de etanol nos fundos e consumo energético. O OI é calculado como a fração dos cenários que atendem todas as especificações simultaneamente. Adicionalmente, um *soft sensor* multivariável foi desenvolvido por regressão linear múltipla, conforme a Equação (1):

$$x_{EtOH} = \beta_0 + \beta_1 \cdot T_{stage5} + \beta_2 \cdot RR + \beta_3 \cdot x_{feed} + \beta_4 \cdot (S/F) \quad (1)$$

## 3. Resultados e discussão

### 3.1. Índices de operabilidade

A convergência de todos os 5.000 cenários, sem falhas numéricas ou valores ausentes, reforça a robustez do modelo e a confiabilidade dos índices de operabilidade apresentados. Porém, a análise dos resultados das simulações revelou uma janela operacional extremamente restrita, confirmando a elevada sensibilidade do processo de destilação extrativa às condições operacionais. A Tabela 2 apresenta os índices de operabilidade. Apenas 1,98% do espaço DOE atinge pureza  $\geq 99,5\%$ . Quando múltiplas especificações são combinadas (pureza  $\geq 99,5\%$  + perda  $\leq 0,02\%$  + energia  $\leq 1.800 \text{ kW/m}^3$ ), o índice cai para 0,28% (14 de 5.000 cenários). Este valor quantifica a extrema restritividade da janela operacional e fundamenta a necessidade de um gêmeo digital para suporte à decisão. Mesmo no cenário moderado (pureza  $\geq 99,0\%$ ), o índice combinado é de apenas 8,72%.

**Tabela 2.** Índices de operabilidade (n = 5.000).

Especificação	OI (%)
Pureza $\geq 99,5\%$	1,98
Pureza $\geq 99,3\%$	10,60
Pureza $\geq 99,0\%$	48,54
Perda no fundo $\leq 0,02\%$	42,34
Energia $\leq 1.800 \text{ kW/m}^3$	68,58

Combinado (Pureza $\geq 99,0\%$   Perda no fundo $\leq 0,02\%$   Energia $\leq 1.800 \text{ kW/m}^3$ )	8,72
Combinado estrito (Pureza $\geq 99,3\%$   Perda no fundo $\leq 0,02\%$   Energia $\leq 1.800 \text{ kW/m}^3$ )	1,48
Combinado ultra (Pureza $\geq 99,5\%$   Perda no fundo $\leq 0,02\%$   Energia $\leq 1.800 \text{ kW/m}^3$ )	0,28

### 3.2. Análise de sensibilidade

A razão de refluxo (RR) é a variável manipulada dominante, com correlação de 0,253 com a pureza. A Tabela 3 mostra que cada incremento na RR gera ganhos de pureza ao custo de consumo energético adicional, com eficiência marginal decrescente. Para atingir 99,5%, é praticamente necessário  $RR \geq 2,0$  (apenas 0,3% dos cenários com  $RR \leq 1,8$  atingem esta meta), porém a RR sozinha não é suficiente, a composição da alimentação e razão S/F precisam estar em faixas específicas simultaneamente, reforçando a natureza multidimensional dos espaços de operabilidade.

**Tabela 3.** Efeito da razão de refluxo sobre pureza e consumo energético.

Faixa de RR	Pureza média (%)	Energia ( $\text{kW/m}^3$ )
< 1,94	98,90	1.649
1,94 – 2,07	98,96	1.712
2,07 – 2,18	98,99	1.753
2,18 – 2,33	99,03	1.796
> 2,33	99,07	1.876

A temperatura do condensador varia em apenas  $0,45 \text{ }^\circ\text{C}$  ( $78,68\text{--}79,13 \text{ }^\circ\text{C}$ ) ao longo de todo o DOE, confirmando controle termodinâmico do azeótropo no topo. Toda regulação de qualidade deve ser feita via perfil interno da coluna, corroborando recomendações da literatura de destilação.

### 3.3. Soft sensor multivariável

A temperatura do estágio 5 sozinha apresenta  $R^2$  de apenas 0,104. Contudo, o modelo multivariável da Equação (1), que combina  $T_{\text{stage5}}$ , RR, composição da alimentação e razão S/F, alcança  $R^2 = 0,857$  ( $R^2_{\text{adj}} = 0,857$ ;  $\text{RMSE} = 0,00094$ ). Os coeficientes são:  $\beta_0 = 1,605$ ;  $\beta_1 = -0,00710$ ;  $\beta_2 = -0,01767$ ;  $\beta_3 = 0,00118$ ;  $\beta_4 = 0,05842$ . A Figura 1 mostra a performance. Todas as variáveis predictoras são medidas rotineiramente em campo, dispensando analisadores de composição em linha.

**Controle Inferencial: Soft Sensor Multivariável**

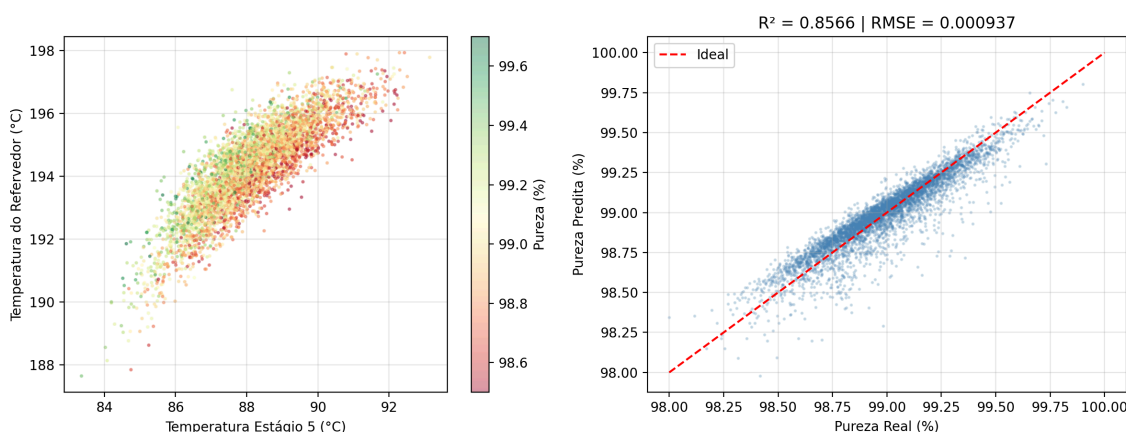


Figura 1. Soft sensor: (a) Temperatura no Estágio 5 vs. Temperatura do Refervedor colorido por pureza; (b) pureza predita vs. real ( $R^2 = 0,857$ ).

### 3.4. Fronteira de Pareto e otimização

A análise de Pareto identificou condições ótimas caracterizadas por RR moderada (~1,8–2,0), fração de etanol na alimentação elevada (0,906–0,918) e razão S/F moderada (~0,7–0,9). Nestas condições, purzas de 99,4–99,9% são alcançadas com consumo de 1.543–1.630 kW/m<sup>3</sup>, representando economia de até 12% em relação à operação convencional de alta pureza, representando uma redução significativa de custos operacionais. A Figura 2 ilustra os *trade-offs* entre a pureza, energia e o custo anual.

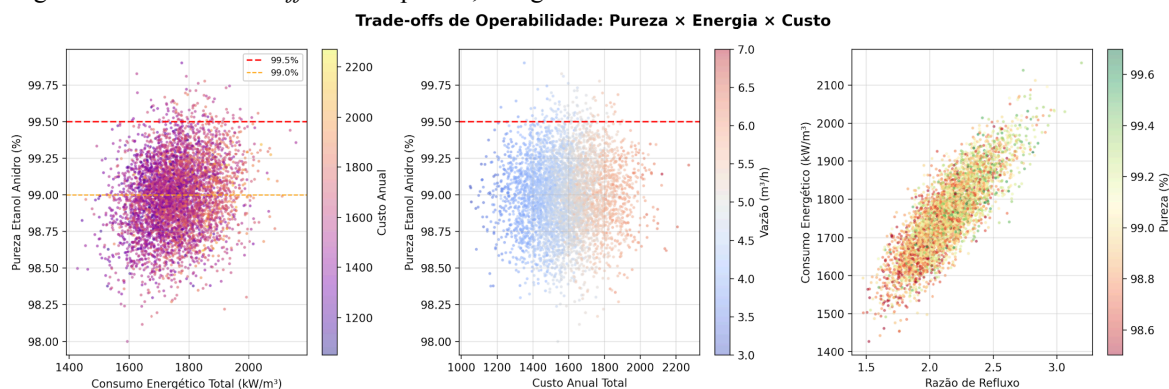


Figura 2. Trade-offs de operabilidade: pureza vs. energia vs. custo anual total.

A Figura 3 apresenta o heatmap do índice de operabilidade no espaço razão S/F × razão de refluxo, diretamente aplicável como mapa de referência para o operador no contexto do gêmeo digital.

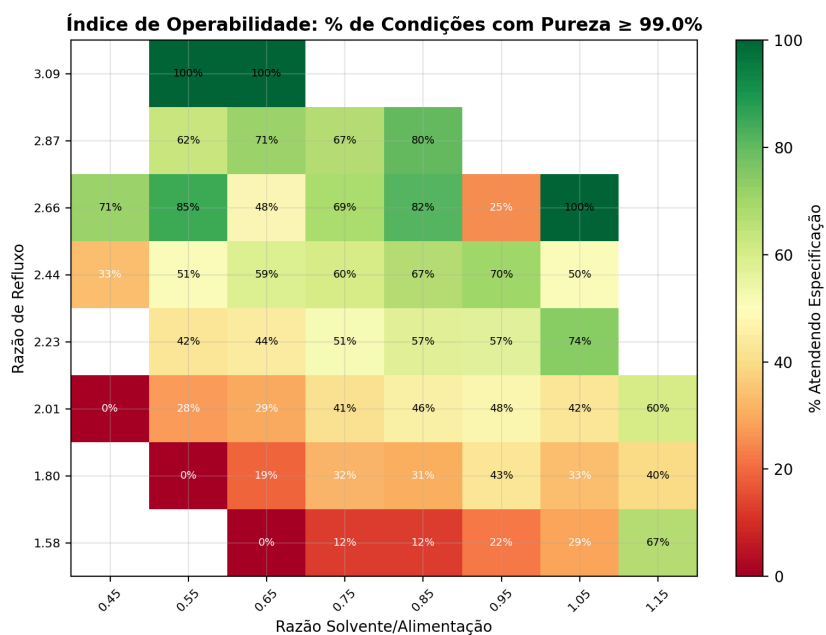


Figura 3. Heatmap: % de condições com pureza ≥ 99,0% no espaço razão S/F × razão de refluxo.

## 4. Conclusão

Este trabalho quantificou a operabilidade de um sistema de destilação extrativa de etanol anidro utilizando um gêmeo digital baseado em DWSIM com 5.000 cenários de DOE. O índice de operabilidade combinado de apenas 0,28% no cenário ultra estrito (pureza ≥ 99,5% + baixa perda + baixa energia) demonstra quantitativamente que a operação sem suporte preditivo é inviável para atendimento consistente das

especificações. O *soft sensor* desenvolvido ( $R^2 = 0,857$ ) viabiliza estimativa contínua de pureza utilizando apenas medições convencionais, enquanto a análise de Pareto fornece os *setpoints* para otimização em tempo real.

As perspectivas futuras incluem: (i) validação dinâmica com dados de planta piloto; (ii) modelos de machine learning para melhorar a predição; (iii) extensão da análise de operabilidade dinâmica (Georgakis et al., 2003); e (iv) integração com controle preditivo baseado em modelo (MPC).

**Agradecimentos:** Os autores agradecem à comunidade DWSIM, em especial a Daniel Medeiros, pelo desenvolvimento e manutenção do simulador open-source que viabilizou este trabalho. Agradecem também ao Prof. Fernando V. Lima (West Virginia University) e sua equipe pelo desenvolvimento da biblioteca Opyrability, cujo framework de operabilidade fundamentou a metodologia aqui empregada.

**Repositório:** <https://github.com/Spogis/dt-extractive-distillation-operability>

### Referências

- V. Alves e F. V. Lima: On the selection of control structures using process operability analysis, *Control Engineering Practice* (153), 106117, 2024
- J. Kang, S. Mirzaei, Z.H. Yang: Sequence-to-sequence digital twin model in chemical plants with internal rolling training algorithm, *Applied Soft Computing* (143), 110398, 2023.
- D. W. O. de Medeiros: DWSIM – Open Source Chemical Process Simulator, 2023. Disponível em: <https://dwsim.org>.
- V. Gazzaneo, J. C. Carrasco, D. R. Vinson e F. V. Lima: Process operability algorithms: Past, present, and future developments, *Industrial & Engineering Chemistry Research* (59), 2457–2470, 2020.
- C. Georgakis, D. Uztürk, S. Subramanian e D. R. Vinson: On the operability of continuous processes, *Control Engineering Practice* (11), 859–869, 2003.
- I. D. Gil, J. M. Gómez e G. Rodríguez: Control of an extractive distillation process to dehydrate ethanol using glycerol as entrainer, *Computers & Chemical Engineering* (39), 129–142, 2012.
- J. A. Jaime, G. Rodríguez, J. A. Betancourt e I. D. Gil: Optimization and experimental validation of an extractive distillation system with solvents mixture as separating agent, *Chemical Engineering and Processing – Process Intensification* (189), 109387, 2023.
- R. Kender, F. Kaufmann, F. Röbber, B. Wunderlich, D. Golubev, I. Thomas, A.-M. Ecker, S. Rehfeldt e H. Klein: Development of a digital twin for a flexible air separation unit using a pressure-driven simulation approach, *Computers & Chemical Engineering* (151), 107349, 2021.
- I. A. Udugama, M. A. Taube e B. Young: A digital-twin approach to distillation control education, *The Chemical Engineer*, 2023.
- D. R. Vinson e C. Georgakis: A new measure of process output controllability, *Journal of Process Control* (10), 185–194, 2000.
- Y. Zhang, W. Wang, Q. Yang, X. Tang, W. Ruan, Y. Li et al.: Promoting digital twin technology application for process industry: A novel generation modelling platform and its implementations, *Digital Twins and Applications* (1), 2024. DOI: 10.1049/dgt2.12010.