

Integração de Simulação em DWSIM e Otimização Bayesiana em Python para a Síntese de Sistema de Separação

Victor Hugo Brito Schettini^a, Roymel Rodríguez Carpio^{a*}, Argimiro Resende Secchi^{a,b}

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

^bPrograma de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

*roymel@eq.ufrj.br

RESUMO

Apresenta-se uma metodologia para a síntese de sistemas de separação compostos por colunas de destilação. A abordagem integra a simulação de processos no DWSIM a rotinas de análise e otimização em Python, permitindo a determinação simultânea de dimensões e de condições operacionais ótimas. Utilizou-se a separação de uma mistura de benzeno, tolueno e xilenos (BTX) como estudo de caso, dada sua relevância industrial. A metodologia emprega modelos de colunas simplificadas durante a etapa de otimização bayesiana, e subsequentemente, modelos rigorosos para a validação dos resultados. A sequência das separações, as razões de refluxo e as pressões de operação foram as variáveis de decisão, enquanto a minimização do custo total anualizado (CTA) – composto por CAPEX anualizado e OPEX – foi objetivo da otimização. Os resultados demonstraram o potencial da metodologia em identificar parâmetros de projeto próximos ao ótimo global em tempo computacional satisfatório.

Palavras-chave: Síntese; Separação por destilação; BTX; Otimização Bayesiana.

1. Motivação

A separação de benzeno, tolueno e xilenos (BTX) constitui uma operação estratégica na indústria química, dada a alta versatilidade e o valor agregado desses compostos. Classificados como produtos de primeira geração da cadeia petroquímica, os aromáticos BTX são obtidos primordialmente via reforma catalítica de nafta ou por meio do craqueamento a vapor de frações de nafta e gásóleo atmosférico. A obtenção dos compostos individuais ocorre, usualmente, por destilação fracionada, servindo como insumos essenciais para processos petroquímicos subsequentes.

O dimensionamento adequado de colunas de destilação é fundamental para a viabilidade técnica e econômica do processo. Este procedimento compreende a determinação de variáveis críticas, tais como o número de estágios teóricos, a localização do prato de alimentação, a pressão operacional e a razão de refluxo, além da definição da altura e do diâmetro da torre. Tais parâmetros impactam diretamente os custos de capital (CAPEX) e os custos operacionais (OPEX) do sistema. Nesse contexto, o desenvolvimento de metodologias sistemáticas que viabilizem a síntese de sequências de separação de forma rigorosa e computacionalmente eficiente permanece como uma fronteira relevante na pesquisa em engenharia química.

Este trabalho apresenta uma metodologia para a síntese de sistemas de separação por destilação, fundamentada na integração entre o simulador de processos DWSIM e rotinas de otimização em Python. A abordagem permite a determinação simultânea de parâmetros geométricos e condições operacionais de modo a minimizar o Custo Total Anualizado (CTA), integrando de forma sistêmica as parcelas de CAPEX e OPEX.

2. Metodologia

2.1. Descrição do problema de síntese

O estudo de caso selecionado para a validação da metodologia proposta consiste no projeto de um sistema de separação por destilação para uma mistura de benzeno, tolueno e isômeros de xileno (m-, p-, e o-xileno). O objetivo é a obtenção de três correntes de alta pureza: (1) Benzeno de 99,9% molar, (2) Tolueno de 99,8% molar e (3) Xilenos de 99,5% molar. O desafio de síntese reside na identificação da configuração de menor Custo Total Anualizado (CTA), calculado a partir da composição entre o dispêndio de capital (CAPEX) anualizado e as despesas operacionais (OPEX).

2.2. Modelagem e simulação do caso base

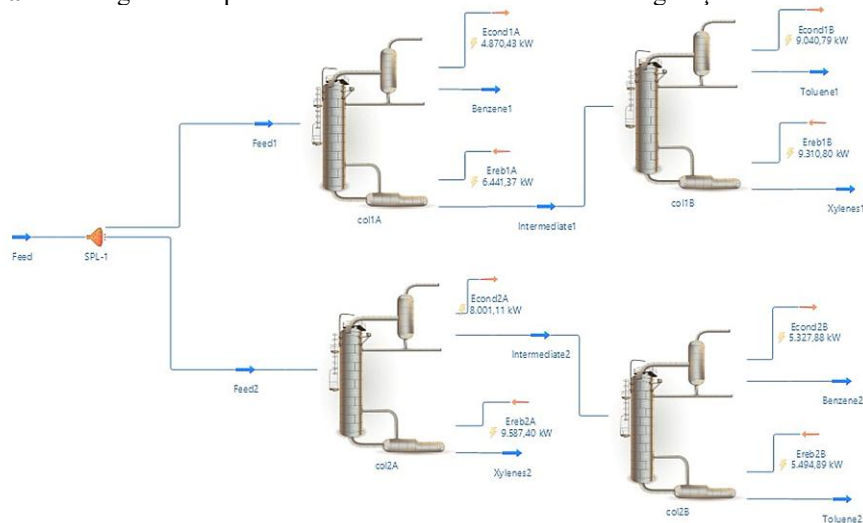
A modelagem e a simulação do processo foram realizadas no simulador DWSIM, utilizando-se o modelo termodinâmico de Peng-Robinson. Essa equação de estado foi selecionada por sua comprovada adequação ao processamento de hidrocarbonetos e compostos não polares, conforme recomendado pela literatura especializada (Turton et al., 2018; Carlson, 1996). As condições operacionais e a composição da carga de alimentação estão detalhadas na Tabela 1.

Tabela 1. Condições da corrente de entrada (mistura original a ser separada).

Parâmetro	U/M	Valor	Parâmetro	U/M	Valor
Temperatura	°C	80	Tolueno	% molar	25
Pressão	bar	2	Para-xileno	% molar	20
Vazão	kmol/h	800	Orto-xileno	% molar	9
Benzeno	% molar	26	Meta-xileno	% molar	20

Para a obtenção dos três produtos de alta pureza, é necessária a utilização de duas colunas de destilação operando em série. A literatura identifica duas alternativas principais para a sequência de separação (Seader e Henley, 2006). O fluxograma de processo em DWSIM para ambas as alternativas de separação é apresentado na Figura 1, tendo sido modelado de modo que a simulação forneça os resultados de ambas as topologias simultaneamente. A Configuração 1 (Conf. 1) adota a sequência direta, na qual o benzeno é recuperado no topo da primeira coluna (col1A), enquanto a separação entre tolueno e xilenos ocorre na segunda unidade (col1B). Em contrapartida, a Configuração 2 (Conf. 2) segue a sequência indireta, onde os xilenos são removidos pelo fundo da primeira coluna (col2A) e a separação benzeno/tolueno é realizada na coluna subsequente (col2B).

Figura 1. Fluxograma do processo em DWSIM com as duas configurações do sistema de separação.



A etapa de otimização utiliza o modelo de coluna simplificada (*Shortcut Column*) do DWSIM, fundamentado nas equações de *Fenske-Underwood-Gilliland* para projetos preliminares. Essa abordagem permite um dimensionamento ágil a partir da especificação da carga, pressão de operação, componentes-chave, pureza da separação e razão de refluxo. No cenário base, definiu-se uma pressão operacional de 1 bar para todas as unidades e uma razão de refluxo equivalente a 1,5 vezes o valor mínimo. Após a convergência, o modelo fornece parâmetros essenciais para a estimativa de custos, incluindo o número de estágios, a localização do prato de alimentação, as dimensões físicas (altura e diâmetro) e as cargas térmicas de refeedores e condensadores (Kister, 1992).

2.3. Custo total anualizado

Na síntese de sistemas de separação, o CTA é consolidado como o critério principal para a definição da topologia e do dimensionamento dos equipamentos. A minimização dessa métrica visa identificar soluções que estabeleçam um equilíbrio ideal entre o investimento de capital e as despesas operacionais (Turton et al., 2018).

Como indicador econômico abrangente, o CTA consolida tanto os gastos com ativos fixos quanto os custos de utilidades, sendo calculado conforme a Equação (1).

$$CTA = \frac{CAPEX}{TVU} + OPEX \quad (1)$$

Neste estudo, o CAPEX abrange o custo de aquisição dos equipamentos de processo principais — especificamente colunas de destilação (incluindo internos) e trocadores de calor — acrescido dos custos de instalação e provisões para contingências. Itens auxiliares, como tubulações, válvulas e sistemas de bombeamento de pequeno porte, foram desconsiderados devido ao seu impacto marginal em estimativas preliminares. Por outro lado, o OPEX consolida as despesas recorrentes da operação, contemplando o consumo de utilidades (vapor e água de resfriamento), manutenção, e encargos administrativos (Peters et al., 2003; Turton et al., 2018). As premissas econômicas consideram um Tempo de Vida Útil (TVU) de 5 anos e uma disponibilidade operacional de 8000 horas anuais.

As principais correlações empregadas para a estimativa do CAPEX e do OPEX estão detalhadas nas Tabelas 2 e 3, respectivamente. Para garantir a uniformização monetária de equações provenientes de diferentes períodos, aplicou-se o índice CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*) de 2024. Já os custos de instalação, contingências, manutenção e encargos administrativos foram estimados por meio de fatores de custo aplicados sobre o valor de aquisição dos equipamentos ou sobre o consumo de utilidades, seguindo a metodologia de Peters et al. (2003).

Tabela 2. Equações utilizadas para estimar o custo de capital.

Elemento	Equações	Referência
Corpo da coluna	$C_{shell} = 10^{(3,4974 + 0,4485 \times \log W + 0,1074 \times (\log W)^2)}$	Peters et al. (2003)
	$W = \pi \times D \times H \times t \times \rho_{material}$	
Internos da coluna	$C_{prato} = 150 \times D^{1,8}$	Kister (1992)
	$C_{trocador} = 10^{(4,8306 - 0,8509 \times \log A + 0,3187 \times (\log A)^2)}$	
Trocadores	$A = \frac{Q}{U \times \Delta T_{LM}}$ $\Delta T_{LM} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \left[\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2} \right]}$	Turton et al. (2018)

Tabela 3. Equações utilizadas para estimar o custo de operação.

Elemento	Equações	Referência
Vapor de aquecimento	$C_{aquec} = C_{vapor} \times F_{vapor} \times t_{op}$ $F_{vapor} = \frac{Q_{ref}}{H_{vap}}$	Turton et al. (2018)
Água de resfriamento	$C_{resfr} = C_{agua} \times F_{agua} \times t_{op}$ $F_{agua} = \frac{Q_{cond}}{Cp_{agua} \times \Delta T_{agua}}$	
		Perry e Green (2018)

2.4. Formulação da otimização

Para o dimensionamento ótimo do sistema de separação formulou-se um problema de otimização com as seguintes variáveis de decisão:

1. Sequência da separação: variável categórica com as topologias Conf. 1 ou Conf. 2;
2. Pressão de operação: variável contínua no intervalo entre 0,4 e 1,2 bar;
3. Relação de refluxo (RR/RR_{min}) da coluna A: variável contínua entre 1,1 e 3,0;
4. Relação de refluxo (RR/RR_{min}) da coluna B: variável contínua entre 1,1 e 3,0.

A Função Objetivo (FO) consistiu na minimização do CTA, adimensionalizado em relação ao valor do cenário base. Todas as restrições de igualdade do problema físico, incluindo as purezas dos produtos finais, foram garantidas pela simulação em DWSIM. Já o modelo econômico para o cálculo do CTA foi implementado em

Python. Foi aplicado o algoritmo de Otimização Bayesiana (OB) disponível na biblioteca *Bayesian Optimization* (Garrido e Hernández, 2020), com a função de aquisição *Upper Confidence Bound* (UCB) para mediar o compromisso entre busca local e global. O algoritmo foi configurado com 30 pontos de amostragem inicial e 500 iterações de busca guiada pela função de aquisição.

2.5. Validação utilizando colunas rigorosas

A configuração ótima obtida previamente foi transposta para o modelo rigoroso de coluna de destilação no DWSIM. Para a convergência desta nova simulação foram aplicados os parâmetros derivados da solução ótima simplificada: pressão de operação, número de estágios teóricos, prato de alimentação, vazão molar de fundo e razão de refluxo operacional.

O objetivo desta etapa foi validar se o sistema de separação ótimo, fundamentado em modelos *shortcut*, atende às especificações de pureza sob condições rigorosas de cálculo. Caso as metas de separação não fossem atingidas, previu-se um ajuste na razão de refluxo de ambas as colunas até garantir a pureza dos produtos.

3. Resultados

3.1. Resultados do caso base e da análise de sensibilidade

A Tabela 4 apresenta os resultados do cenário base para ambas as configurações. Observa-se que, sob essas condições, a Configuração 2 apresenta valores inferiores de CAPEX e OPEX e, por conseguinte, um CTA menor do que a Configuração 1. Devido a esse desempenho, o CTA da Configuração 2 foi definido como a referência para o adimensionamento da FO nas etapas subsequentes.

Tabela 4. Resultados do cenário base.

Parâmetros	Configuração 1	Configuração 2
CAPEX (\$/ano)	19.846.212,29	17.304.101,34
OPEX (\$/ano)	10.760.615,30	10.304.023,22
CTA (\$/ano)	30.606.827,60	27.608.124,56

Visando compreender a influência individual de cada variável de decisão sobre a função objetivo, realizaram-se análises de sensibilidade unidimensionais. Embora os gráficos correspondentes não tenham sido incluídos por limitações de espaço, os resultados indicaram a existência de valores intermediários, dentro dos intervalos de busca, que minimizam o CTA. Os valores de cada variável que proporcionaram os melhores desempenhos individuais foram fixados em uma nova simulação, cujos resultados estão reportados na Tabela 5. Ressalta-se que, embora essa abordagem não garanta a identificação do ótimo global para a síntese estudada, os resultados obtidos servem como um importante *benchmark* para avaliar a efetividade da etapa de otimização Bayesiana subsequente.

Tabela 5. Resultados da melhor condição identificada na análise de sensibilidade unidimensional.

Parâmetros	Configuração 1	Configuração 2
Pressão de Operação (bar)	0,56	0,80
Relação de Refluxo – Colunas A/B	1,55 / 1,35	1,55 / 1,40
Redução do CTA, comparação com o cenário base (%)	1,3912	0,330

3.2. Resultados da otimização

Na Otimização Bayesiana com função de aquisição UCB, o ajuste do parâmetro kappa é fundamental, pois governa o compromisso entre busca local e busca global. Valores reduzidos de kappa priorizam o refinamento em regiões conhecidas (busca local), enquanto valores elevados favorecem a exploração de áreas de incerteza (busca global). Por esse motivo, avaliaram-se diferentes valores para este parâmetro, cujos resultados estão consolidados na Tabela 6.

Observa-se que, independentemente do valor de kappa adotado, os valores da FO são consistentes. Ressalta-se que todos os cenários otimizados superam tanto o cenário base quanto a melhor condição identificada na análise de sensibilidade unidimensional, fato que ratifica a eficácia da otimização aplicada. Contudo, desempenhos ligeiramente superiores foram obtidos com kappa igual a 1 e 2. O valor de 2 é amplamente consolidado na literatura por corresponder a um intervalo de confiança de aproximadamente 95% (Srinivas et al., 2010), sendo o padrão em bibliotecas de otimização como o *Scikit-Optimize* devido ao seu equilíbrio prático entre busca global e refinamento

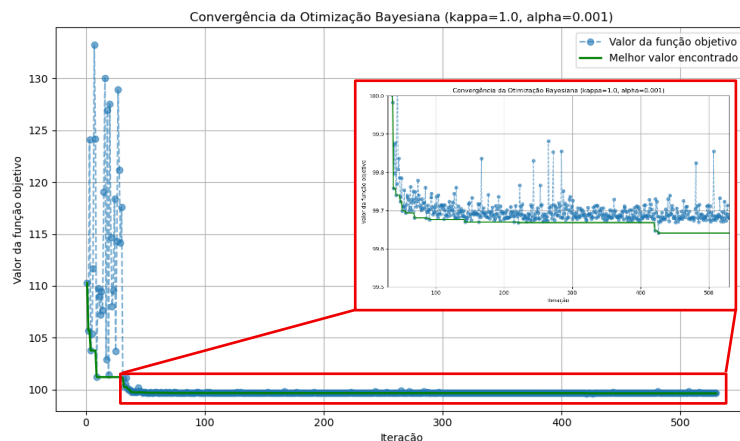
local. Quanto às variáveis de decisão, a Configuração 2 mostrou-se consistentemente superior em todos os cenários. As condições ótimas convergiram para uma pressão de operação entre 0,77 e 0,82 bar, com razões de refluxo variando entre 1,56–1,60 para a Coluna A e 1,38–1,43 para a Coluna B. Tais resultados evidenciam uma região de estabilidade operacional onde o Custo Total Anualizado (CTA) do sistema é minimizado.

Tabela 6. Resultados da otimização.

Valor de kappa	Redução do CTA (%)	Nº. de simulação correspondente ao melhor valor	Sequência da separação	Pressão de operação (bar)	Relação de Refluxo (RR/RR _{min}) da coluna A	Relação de Refluxo (RR/RR _{min}) da coluna B
0,5	0,331	275	Conf. 2	0,82	1,56	1,40
1,0	0,359	426	Conf. 2	0,77	1,57	1,43
2,0	0,351	446	Conf. 2	0,78	1,60	1,41
3,0	0,332	352	Conf. 2	0,78	1,60	1,38
5,0	0,331	439	Conf. 2	0,81	1,57	1,42

A título de exemplo, a Figura 2 apresenta a evolução da FO ao longo das iterações para kappa igual a 1. Observa-se que nas 30 iterações iniciais o algoritmo realiza uma amostragem geral da região de busca, resultando em oscilações acentuadas na FO. A partir da iteração 31 – marco inicial do uso da função de aquisição – o algoritmo dirige sua busca para regiões promissoras, evidenciando o início da convergência. No detalhe (*zoom*), que foca na etapa de otimização propriamente dita, notam-se pontos que divergem momentaneamente do melhor valor encontrado; tais ocorrências evidenciam a exploração de regiões menos conhecidas, o que ratifica o caráter global do algoritmo e sua capacidade de evitar ótimos locais

Figura 2. Gráfico de convergência da otimização para kappa = 1.



3.3. Resultados do fluxograma ótimo utilizando colunas rigorosas.

A transposição direta dos parâmetros ótimos para a simulação rigorosa apresentou desafios de convergência, uma ocorrência comum na transição entre modelos simplificados e rigorosos. Para superar esse obstáculo, adotou-se uma estratégia iterativa: a tolerância de cálculo das colunas foi inicialmente relaxada para 0,01 para viabilizar uma solução preliminar. A partir desse resultado, os perfis internos de composição e temperatura foram atualizados, servindo como estimativas iniciais que facilitaram a convergência final sob critérios mais rigorosos.

Embora os resultados tenham se aproximado dos limites especificados, as correntes de produto não atingiram a pureza requerida apenas com os parâmetros provenientes da otimização. Essa discrepância ressalta as limitações intrínsecas aos modelos de coluna *shortcut*, cujas simplificações nem sempre capturam a complexidade fenomenológica do sistema rigoroso. Para assegurar a conformidade, realizou-se um ajuste fino nas razões de refluxo de ambas as colunas (de 1,19 para 1,65 para a col2A e de 1,81 para 1,85 na col2B).

É importante notar que a solução ajustada representa uma das múltiplas configurações operacionais capazes de satisfazer as especificações. Contudo, a metodologia de otimização aplicada indica que o fluxograma final

convergiu para um Custo Total Anualizado (CTA) próximo ao ótimo global factível para este processo de separação.

4. Conclusão

A metodologia de síntese adotada demonstrou a eficácia da integração entre o simulador de processos DWSIM e o algoritmo de Otimização Bayesiana, via Python, para o projeto de sistemas de separação industrial. Essa abordagem permitiu uma exploração eficiente do espaço de busca, culminando na identificação de uma configuração e condições operacionais que convergem para a região do mínimo global do Custo Total Anualizado.

O modelo simplificado (*shortcut*) apresentou desvios marginais em relação às especificações de pureza dos produtos quando transposto para o modelo de colunas rigorosas. No entanto, o atendimento das especificações foi alcançado mediante um ajuste fino nas razões de refluxo; comprovando que, apesar das limitações intrínsecas às equações de Fenske-Underwood-Gilliland, o método é uma ferramenta poderosa e ágil para o projeto preliminar de sistemas complexos.

Nomenclatura

Elemento	Descrição	Elemento	Descrição
A	Área útil de troca térmica (m ²)	F_{vapor}	Consumo de vapor (kg/h)
C_{agua}	Custo da água (\$/kg)	H	Altura da coluna (in)
CAPEX	Custo de Investimento (\$)	H_{vap}	Entalpia de vaporização (kJ/kg)
C_{aquec}	Custo do aquecimento (\$/ano)	OPEX	Custos Operacionais (\$/ano)
Cp_{agua}	Cap. calorífica água (kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹)	Q	Carga térmica (W)
C_{prato}	Custo de prato para coluna (\$)	t	Grossura da parede da coluna (in)
C_{resfr}	Custo do resfriamento (\$/ano)	t_{op}	Tempo de operação (horas/ano)
C_{shell}	Custo de corpo de coluna (\$)	TVU	Tempo de Vida Útil (anos)
$C_{trocador}$	Custo do trocador de calor (\$)	U	Coef. de transf. de calor (W.m ⁻² .K ⁻¹)
C_{vapor}	Custo do vapor (\$/kg)	W	Peso do corpo da coluna (lb)
CTA	Custo Total Anualizado (\$/ano)	$\rho_{material}$	Densidade do material (lb/in ³)
D	Diâmetro da coluna (in)	ΔT_{agua}	Dif. de temp. água resfriamento (K)
F_{agua}	Consumo de água (kg/h)	ΔT_{LM}	Dif. de temp. média logarítmica (K)

Agradecimentos: Os autores agradecem o apoio financeiro da FAPERJ – Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro.

Referências

- Carlson, E. C. “Don't gamble with physical properties for simulations”. Chemical Engineering Progress, v. 92, n. 10, p. 35-46, 1996.
- Kister, H. Z. “Distillation Design”. McGraw-Hill, 1992.
- Perry, R.; Green, D. “Perry's Chemical Engineers' Handbook”. 9th ed. New York: McGraw-Hill, 2018.
- Peters, M. S.; Timmerhaus, K. D.; West, R. E. “Plant Design and Economics for Chemical Engineers”. 5ª ed. McGraw-Hill, 2003.
- Seader, J. D.; Henley, E. J. “Separation Process Principles: Chemical and Biochemical Operations”. 2nd ed. Wiley, 2006.
- Srinivas, N.; Krause, A.; Kakade, S. M.; Seeger, M. “Gaussian Process Optimization in the Bandit Setting: No Regret and Experimental Design”. In: Proceedings of the 27th International Conference on International Conference on Machine Learning (ICML). Haifa, Israel: Omnipress, p. 1015–1022, 2010.
- Turton, R.; Bailie, R. C.; Whiting, W. B.; Shaeiwitz, J. A. “Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes”. 5ª ed. Prentice Hall, 2018.
- Garrido, E.C.M., Hernández, D.L. “Dealing with categorical and integer-valued variables in Bayesian Optimization with Gaussian processes”. Neurocomputing, pp 20-35, v. 380, 2020.