



UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

CAIO OLIVEIRA BIONDI

**MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO DO PLANEJAMENTO
DA PRODUÇÃO DE UMA REFINARIA DE PETRÓLEO**

CAMPINAS

2016

CAIO OLIVEIRA BIONDI

**MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO DO PLANEJAMENTO
DA PRODUÇÃO DE UMA REFINARIA DE PETRÓLEO**

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Sávio Souza Venâncio Vianna

ESSE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO CAIO OLIVEIRA BIONDI, E ORIENTADA PELO PROF. DR. SÁVIO SOUZA VENÂNCIO VIANNA.

CAMPINAS

2016

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): Não se aplica.

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura
Elizangela Aparecida dos Santos Souza - CRB 8/8098

B523m Biondi, Caio Biondi, 1989-
Modelagem e otimização do planejamento da produção de uma refinaria de petróleo / Caio Oliveira Biondi. – Campinas, SP : [s.n.], 2016.

Orientador: Sávio Souza Venâncio Vianna.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Programação linear. 2. Planejamento. 3. Produção. I. Vianna, Sávio Souza Venâncio, 1975-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Modeling and production planning optimization of an oil refinery

Palavras-chave em inglês:

Linear programming

Planning

Production

Área de concentração: Engenharia Química

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora:

Sávio Souza Venâncio Vianna [Orientador]

Roger Josef Zemp

José Vicente Hallak d'Angelo

Aurélio Ribeiro Leite de Oliveira

Data de defesa: 30-05-2016

Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

Dissertação de mestrado defendida por Caio Oliveira Biondi e aprovada em 30 de maio de 2016 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Roger Josef Zemp (Presidente) – FEQ/UNICAMP

Prof. Dr. José Vicente Hallak d'Angelo – FEQ/UNICAMP

Prof. Dr. Aurélio Ribeiro Leite de Oliveira – IMECC/UNICAMP

A ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no processo de vida acadêmica do aluno.

Para minha mãe, por todo incentivo e amor.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Vana e Daniel, irmãos, Igor e Iuri e todos os familiares pelo incentivo e confiança em mais uma importante etapa da minha vida. Sem o apoio de vocês, com certeza, nada disso teria sido possível.

Agradeço ao professor Dr. Sávio S. V. Vianna pela orientação, paciência e confiança no desenvolvimento desse trabalho.

Agradeço ao engenheiro Osvaldo Menossi por compartilhar o seu conhecimento com toda a paciência e disponibilidade.

Agradeço ao André e Gabriela pela parceria e apoio.

Agradeço também aos meus queridos amigos que, durante esses anos, foram minha segunda família em Campinas. Foram eles que me confortaram nos momentos difíceis e compartilharam os momentos de alegria. Em especial, agradeço ao Junot, Arnaldo, Edsel e Bruna pelo carinho e incentivo. À Raquel e Renata pela ajuda que me foi dada desde muito antes do mestrado. Ao Rayan, Yuri, Diego, Rafa e Joka pela confiança e amizade.

Agradeço aos colegas de laboratório pelo apoio e ajuda sempre que precisei.

Agradeço a CAPES pelo apoio financeiro em parte dessa jornada.

RESUMO

A indústria química passou por grandes mudanças nas últimas décadas e cada vez mais precisa se adaptar para continuar competitiva em uma economia extremamente globalizada como a atual. Crescentes aumentos de custo com energia, escassez de matéria prima e restrições ambientais severas, indicam a necessidade de otimizar os processos produtivos para que seja possível permanecer dentro do mercado.

A indústria do petróleo, devido a sua dinamicidade e constantes flutuações de preço de matéria prima, é um exemplo claro da necessidade de se investir em técnicas de otimização. Uma refinaria, por exemplo, precisa tomar decisões diárias envolvendo o seu planejamento de produção para que seja possível maximizar seus lucros atendendo às demandas do mercado, restrições de produção e compra de matéria prima.

Foi proposta, então, a modelagem de uma refinaria de petróleo com capacidade de produção de 100.000 bbl/dia onde os seguintes pontos foram considerados: oferta de petróleo para compra, demandas do mercado, unidades de processamento, capacidades de processamento, restrições de qualidade e restrições ambientais. O objetivo é escolher a melhor combinação de compra de óleos crus que gere o maior lucro possível.

Após simulações envolvendo oito cenários distintos com a sugestão de modificações na modelagem proposta inicialmente como, por exemplo, construção de novas unidades de processamento e aumento do preço de venda de alguns produtos, foi possível chegar a uma condição ótima em que a refinaria desse lucro e ele fosse o maior possível atendendo todas as restrições impostas.

ABSTRACT

The chemical industry has undergone major changes in recent decades and increasingly needs to adapt itself to remain competitive in a highly globalized economy. Increasing cost with energy, scarcity of raw materials and severe environmental restrictions, indicate the need to optimize production processes in order to stay in the market.

The oil industry, due to its dynamism and constant price fluctuations of raw materials, is a good example of the need to invest in optimization techniques. A refinery, for example, needs to take daily decisions involving its production planning so that the market demands are attended and profits are maximized.

It was proposed the modeling of an oil refinery with a production capacity of 100,000 bbl/day. The following were considered: oil supply for purchase, market demands, processing units, processing capabilities, quality restrictions and environmental constraints. The goal is to choose the best combination of buying crude oil that generates the highest profit possible.

After simulations involving eight different scenarios with the suggestion of changes in the modeling originally proposed, for example, construction of new processing units and increase the sale price of some products, it was possible to reach an optimal condition where the refinery become profitable meeting all imposed restrictions.

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1: Diagrama esquemático do problema da Refinaria.	36
Figura 3.2: Diagrama esquemático para o <i>pool</i> de Nafta Pesada (NP).....	37
Figura 3.3: Convenção para nomenclatura das correntes.....	38
Figura 4.1: Classificações dos problemas de otimização. (FONTE: Adaptado de BIEGLER et al., 2004)	49
Figura 4.2: (a) conjunto convexo; (b) não convexo; (c) politopo convexo e (d) poliedro. (FONTE: Adaptado de BREGALDA et al., 1983).....	52
Figura 4.3: Vértices de um poliedro de um problema de programação linear. (FONTE: Adaptado de BREGALDA et al., 1983)	53
Figura 4.4: Fluxograma da lógica do algoritmo <i>SIMPLEX</i> . (FONTE: Adaptado de BOLDRINI et al., 1983)	56
Figura 4.5: Representação da atuação do método <i>SIMPLEX</i> e pontos interiores....	61
Figura 5.1: Esquema simplificado de uma refinaria de petróleo. (FONTE: Adaptado de HIMMELBLAU et al., 2001)	68
Figura 5.2: Esquema representativo das colunas de destilação. (FONTE: Adaptado de HIMMELBLAU et al., 2001)	70
Figura 5.3: Esquema representativo do reator de craqueamento térmico.....	73
Figura 5.4: Esquema representativo do sistema de geração de energia elétrica. (FONTE: Adaptado de HIMMELBLAU, 2001)	76

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Descrição dos petróleos internacionais disponíveis para compra.....	31
Tabela 3.2: Unidades de Processo para o modelo em estudo.	31
Tabela 3.3: Especificações das Unidades de Hidrotratamento (UHDT).	32
Tabela 3.4: Lista dos produtos finais comercializáveis.	33
Tabela 3.5: Teor de enxofre e viscosidade para os produtos finais.....	34
Tabela 3.6: Componentes dos produtos finais comercializáveis.	35
Tabela 3.7: Representação dos óleos crus para o modelo.....	44
Tabela 4.1: Quadro representativo do problema de programação linear.....	54
Tabela 4.2: Quadro representativo do método <i>SIMPLEX</i> revisado.	58
Tabela 4.3: Comparação entre o tempo de execução do método <i>SIMPLEX</i> tradicional e o revisado. (FONTE: Adaptado de NGUYEN et al., 2000).....	60
Tabela 4.4: Aplicação de programação matemática em engenharia de processos. (FONTE: Adaptado de BIEGLER et al., 2004)	62
Tabela 5.1: Problemas utilizados para verificação do algoritmo implementado.....	66
Tabela 5.2: Informações sobre o problema da refinaria proposto por Himmelblau et al. (2001).	68
Tabela 5.3: Frações mássicas dos produtos obtidos com o craqueamento térmico.	72
Tabela 5.4: Comparação dos resultados obtidos com solução comercial.	75
Tabela 5.5: Dados de operação das turbinas.	77
Tabela 5.6: Dados de demandas do sistema.....	77
Tabela 5.7: Dados termodinâmicos do vapor.	77
Tabela 5.8: Dados de custo envolvido na geração.	77
Tabela 5.9: Resultado obtido por corrente no problema da geração de vapor.	79
Tabela 5.10: Resultado obtido por corrente no problema da geração de vapor.	79
Tabela 6.1: Composição dos produtos finais a partir dos cortes básicos.	80
Tabela 6.2: Composição final das correntes de produto.....	81
Tabela 6.3: Variação do lucro em função da compra mínima de petróleo.	83
Tabela 6.4: Lucro total em função da compra mínima de petróleo exigida.....	85
Tabela 6.5: Relação entre o aumento do preço de venda, lucro total e lucro/bbl.	86
Tabela 6.6: Quantidade de óleo comprada de cada fornecedor.....	87
Tabela 6.7: Quantidade de cada produto final produzida.	88
Tabela 6.8: Indicadores financeiros da refinaria.	88

LISTAS DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANP - Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis

CFD - Computational fluid dynamics

DL - Diesel Leve

DNG - Debutanized natural gasoline

DP - Diesel Pesado

EIA - Energy Information Administration

FEQ - Faculdade de Engenharia Química

GASO - Gasolina

GLP - Gás Liquefeito de Petróleo

GLV - Gasóleo Leve

GPV - Gasóleo Pesado

GRG - Generalized reduced gradient

IV - Índice de Viscosidade

K - Querosene

MÁX - Maximização

MÍN - Minimização

MPC - Model predictive control

NL - Nafta Leve

NP - Nafta Pesada

NPTQ - Nafta Petroquímica

OSD - Otimização sem derivadas

PI - Programação inteira

PIM - Programação inteira mista

PL - Programação linear

PLIM - Programação linear inteira mista

PNL - Programação não linear

PNLIM - Programação não linear inteira mista

PPL - Problema de programação linear

QAV - Querosene de Aviação

REPLAN - Refinaria de Paulínia - Petrobras

RV - Resíduo de Vácuo

S - Enxofre

S10 - Diesel S-10

S500 - Diesel S-500

UDAV - Unidade de Destilação Atmosférica e Vácuo

UHDTG - Unidade de Hidrotratamento – Gasóleo Leve

UHDTK - Unidade de Hidrotratamento - Querosene

UHDTL - Unidade de Hidrotratamento – Diesel Leve

UHDTP - Unidade de Hidrotratamento – Diesel Pesado

UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas

UREF - Unidade de Reforma Catalítica - Nafta

VB - Variáveis básicas

VNB - Variáveis não básicas

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos romanos

\bar{A} : matriz dos coeficientes

a_{ij} : coeficiente da matriz de variáveis

b_{ij} : valores das igualdades e desigualdades

c_{ij} : coeficientes da função objetivo

$g(x,y)$ - equação de modelagem do sistema

$h(x,y)$ - equação de modelagem do sistema

i : número de linhas da matriz

j : número de colunas da matriz

$Q(x,y)$ - função objetivo

U : matriz identidade

x : variável contínua

y : variável discreta

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	16
1.1 OBJETIVOS.....	19
2. O PETRÓLEO E O PLANEJAMENTO DA PRODUÇÃO	20
2.1 O PETRÓLEO	20
2.1.1 Composição e propriedades do petróleo.....	20
2.2 DERIVADOS DO PETRÓLEO.....	21
2.2.1 Características dos derivados	22
2.3 PROCESSOS DE REFINO.....	23
2.3.1 Processos de separação	24
2.3.2 Processos de conversão	25
2.3.3 Processos de tratamento.....	26
2.4 PLANEJAMENTO DA PRODUÇÃO	27
3. MODELAGEM PROPOSTA.....	30
3.1 MODELAGEM DO PROBLEMA	30
4. OTIMIZAÇÃO.....	48
4.1 CLASSIFICAÇÕES.....	49
4.2 PROGRAMAÇÃO LINEAR.....	50
4.2.1 O algoritmo <i>simplex</i>	53
4.2.2 Novos algoritmos para programação linear.....	57
4.2.2.1 Método de pontos interiores	60
4.3 APLICAÇÕES NA ENGENHARIA QUÍMICA.....	62
5. IMPLEMENTAÇÃO E VERIFICAÇÃO DO ALGORITMO.....	65
5.1 VERIFICAÇÃO DA IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO.....	66
5.1.1 Problema 1	66
5.1.2 Problema 2	66

5.1.3 Problema 3	67
5.1.4 Problema 4	67
5.1.5 Problema 5	69
5.1.6 Problema 6	72
5.1.7 Problema 7	75
6. SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DA MODELAGEM PROPOSTA	80
6.1 SOLUÇÃO SIMPLIFICADA	80
6.2 SOLUÇÃO COMPLETA	81
Cenário 1: Modelagem inicial	82
Cenário 2: Construção de uma UHDTL adicional	84
Cenário 3: Construção de uma UHDTP adicional.....	84
Cenário 4: construção de uma segunda UHDTL adicional	85
Cenário 5: Aumento da demanda do mercado por QAV e Diesel S-500	86
Cenário 6: Aumento do preço de venda dos produtos.....	86
Cenário 7: Saindo de um ponto de partida diferente	87
Cenário 8: Demandas de mercado originais.....	87
7. CONCLUSÕES.....	89
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	91
APÊNDICE A.....	95
APÊNDICE B.....	101
APÊNDICE C	107

1. INTRODUÇÃO

O petróleo já era conhecido na antiguidade, mas sua exploração e refino somente se tornaram expressivos no final do século XIX, primeiramente com a produção do querosene, que substituiria o óleo de baleia, utilizado para iluminação, e, definitivamente, com o advento dos motores de combustão interna, operando segundo o ciclo Otto, que deram origem à demanda da gasolina.

Ao se produzir o querosene, se descobriu o valor da fração mais pesada, então residual, como combustível para uso em caldeiras e no aquecimento, em substituição do carvão. Assim surgiu o óleo combustível, que foi usado primeiramente na indústria e, mais adiante, no comércio e em residências. Já o óleo diesel só veio a encontrar um mercado consumidor a partir de 1919, quando se melhorou os motores que operavam no ciclo Diesel e viabilizou o uso desse combustível em veículos automotores.

No século XIX e nos primeiros anos do século XX, o refino do petróleo consistia apenas no processo de destilação à pressão atmosférica, no qual o petróleo cru era separado em frações com diferentes faixas de ebulição. No entanto, com a descoberta de maiores reservas de óleo e com o crescimento do mercado já visualizado para os combustíveis automotivos, essa configuração de refino não era economicamente atrativa, e, por isso, muitos pesquisadores trabalhavam na melhoria dos processos de refino, visando a um maior aproveitamento da matéria-prima traduzido pela redução da produção de óleo combustível.

Dessa busca, nasceram os chamados processos de fundo de barril, sendo o pioneiro, e de grande importância até os nossos dias, o craqueamento catalítico, desenvolvido em sua primeira versão em 1915 e melhorado continuamente ao longo do século, o que tornou possível aumentar a produção de gasolina e melhorar o seu desempenho (DECROOCQ, 1984).

Ao longo do século XX foram sendo introduzidos outros processos de refino, importantes tanto para a adequação dos volumes de derivados produzidos ao mercado consumidor como para o atendimento aos requisitos de desempenho que foram sendo estabelecidos com o avanço tecnológico dos equipamentos, principalmente os motores automotivos. Enquanto os processos de craqueamento térmico contribuíram para o aumento da produção de gasolina, os processos de

tratamento foram importantes para o ajuste final das características dos derivados. Nos dias de hoje, os processos de hidrorrefino estão entre os de maior importância, porque conferem grande flexibilidade ao refino, permitindo o processamento de petróleos mais baratos e viabilizando o atendimento às crescentes exigências ambientais e de saúde ocupacional. Finalmente, as unidades de tratamento de efluentes líquidos, sólidos ou gases assumem hoje posições de destaque por viabilizarem o desenvolvimento sustentável do refino. Dessa forma, a indústria do petróleo e gás natural conquistou o primeiro lugar como fonte energética mundial. (BRASIL et al., 2012)

No Brasil, a Petróleo Brasileiro S.A (Petrobrás), criada em 1953 pela lei 2004 como uma empresa integrada, tem o monopólio para exploração e produção de petróleo e gás, para o refino de petróleo, para o transporte marítimo e por dutos de petróleo e derivados.

Até 1980, no entanto, apenas 20% do petróleo processado eram produzidos pela empresa, o restante era importado. Na década de 80, seguindo os rumos das grandes companhias internacionais, a empresa passou a atuar mais no ramo “*upstream*”, chegando à década de 2000 com 70% do processamento de petróleo nacional, reduzindo assim gastos com a importação de petróleo.

A partir de 1998, após a quebra do monopólio provocada pela emenda constitucional 9/95, a Petrobrás ainda se manteve integrada, atuando na pesquisa e na lavra das jazidas de petróleo e gás natural, na refinação, na importação e exportação de petróleo e derivados, no transporte de petróleo e derivados por dutos ou navios e na distribuição dos derivados ao mercado; as duas últimas atividades através das suas subsidiárias Petrobrás Transporte S.A e Petrobrás Distribuidora S.A.

Segundo Canelas (2011), no Brasil, a indústria do petróleo é uma das mais importantes e dinâmicas. Economicamente, destaca-se a crescente participação do setor petrolífero no PIB brasileiro que passou de pouco mais de R\$ 50 bilhões em 1990 para cerca de R\$ 440 bilhões em 2010 em números absolutos. Em termos relativos, a participação do setor de petróleo e gás no PIB nacional passou de 3% em 1990 para 12% em 2010.

Esse ramo industrial é um dos segmentos que mais tem adotado soluções computacionais para otimizar as margens de lucro. Um dos meios para fazer isso é através do planejamento de produção e da cadeia de suprimentos, já que existem

inúmeras oportunidades e desafios nessa área, que engloba desde a compra de óleo cru, o transporte para as refinarias, passando pelo processamento nas operações unitárias correspondentes e finalizando na entrega para o consumidor final.

Juntamente com a complexidade do refino, existe um grande grau de liberdade nas operações de processamento. Por exemplo, um dos produtos de refinaria mais consumidos é o combustível para automóveis, em que o cliente não se preocupa com a complexidade ou simplicidade da refinaria, quais petróleos são utilizados, qual tecnologia de processamento ou qual mistura de componentes aditivos foram usados para fazer o combustível. O cliente só se preocupa com o bom funcionamento do seu veículo e o valor gasto (SAHVEV, 2010).

Portanto, as refinarias têm uma complexidade enorme e considerável liberdade para satisfazer a necessidade do cliente e fazer lucro. Isto requer a otimização de múltiplos objetivos na cadeia de abastecimento da refinaria. Os objetivos da otimização da refinaria incluem:

- i. Otimizar a mistura dos óleo brutos;
- ii. Otimizar o consumo de combustível no processamento e minimizar as perdas;
- iii. Otimizar a utilização dos ativos;
- iv. Otimizar a gestão de inventário;
- v. Otimizar a capacidade de utilização dos equipamentos e de tempo de manutenção;
- vi. Otimizar operações unitárias mantendo altos padrões de segurança e a duração do catalisador.

A necessidade e as possibilidades de otimização são tão grandes que é imprescindível a utilização de ferramentas de otimização, não só para chegar ao melhor plano, mas também para avaliar de forma ágil o novo ponto ótimo a partir de mudanças internas ou externas no cenário de negócios.

Moro (2003) enfatiza que o uso de programação matemática pode aumentar os lucros da refinaria em 10 dólares por tonelada de produto refinado. Assim, as decisões envolvidas nas atividades de planejamento da produção devem ser assistidas por sistemas de tomada de decisão, em especial aqueles que empregam técnicas de otimização e programação matemática.

Atualmente, no ambiente das refinarias, as ferramentas de aquisição de dados, simulação e otimização muitas vezes residem em "silos" de operação. Isso

resulta em várias otimizações pontuais e em nível de fábrica apenas. Uma visão holística seria um modelo integrado de otimização da refinaria como um todo, dando aos planejadores a capacidade de avaliar as oportunidades da melhor maneira, com precisão e rapidez (SAHDEV, 2010).

Por fim, a programação produção é de suma importância não só no refino de petróleo como em toda a cadeia química e petroquímica (Gropo, 2004), pois serve de balizamento no planejamento da melhor maneira de se trabalhar em relação às unidades produtivas; buscando atingir um objetivo pré-determinado, com os recursos disponíveis. Em processo como de uma petroquímica, a programação de produção fornece a garantia do atendimento da demanda com a melhor rentabilidade no prazo exigido. A programação deve ser ágil o suficiente para direcionar as tomadas de decisões na empresa, sem perder a oportunidade de ganho ou que inviabilize a mudança de foco da produção, baseado numa modificação de demanda, fornecimento de matéria prima, restrição no processo.

1.1 OBJETIVOS

Esse trabalho tem como objetivo geral a modelagem e otimização de um problema de engenharia típico de uma refinaria de petróleo, que é a melhor seleção de petróleos brutos internacionais para compra que atenda todas as restrições ambientais, de demanda interna e ainda maximize os lucros. Para atingir essa meta, é necessário definir os seguintes objetivos específicos:

- Revisão bibliográfica e pesquisas de campo sobre a indústria de petróleo e o planejamento da produção em refinarias;
- Modelagem de uma refinaria de petróleo;
- Programação de um algoritmo de otimização capaz de resolver esse problema;
- Verificação da implementação do algoritmo através de problemas com resultados conhecidos na literatura;
- Aplicação do software no modelo proposto da refinaria de petróleo e a sua otimização.

2. O PETRÓLEO E O PLANEJAMENTO DA PRODUÇÃO

Antes de iniciar o detalhamento da modelagem da refinaria de petróleo pretende-se nesse capítulo fazer uma revisão teórica dos principais produtos e processos envolvidos para familiarizar o leitor com os termos utilizados nos capítulos seguintes.

2.1 O PETRÓLEO

O petróleo, em seu estado natural, não pode ser aproveitado de forma prática para outros fins que não o de fornecimento de energia via combustão, porém sua composição química, baseada em hidrocarbonetos de grande heterogeneidade molecular, abre caminhos para usos industriais especializados e sofisticados, como o requerido pelas modernas máquinas de combustão interna. Assim, o petróleo, também chamado de óleo cru, é a principal matéria-prima empregada para produzir os derivados tais como combustíveis, lubrificantes e produtos petroquímicos (BRASIL et al., 2012).

2.1.1 Composição e propriedades do petróleo

Tanto a composição química quanto a aparência do petróleo podem variar muito. Seu aspecto pode ser viscoso, com tonalidades desde o castanho-escuro até o preto, passando pelo verde. Quando ocorrem óleos de baixa densidade, apresentam um alto potencial de produção de derivados combustíveis leves, como a gasolina; quando muito escuros, viscosos e densos, possuem grandes proporções de derivados pesados, como o asfalto (SPEIGHT, 1991).

A composição química elementar do petróleo é bastante simples, sendo composto basicamente por carbono, hidrogênio e, em menor proporção, enxofre, nitrogênio, oxigênio e alguns metais. No entanto, as suas propriedades físicas podem variar bastante de acordo com a proporção dos diferentes tipos de compostos presentes, que podem ser divididos em hidrocarbonetos ou resinas, asfaltenos e contaminantes orgânicos (sulfurados, oxigenados, nitrogenados e organometálicos).

O petróleo pode ser classificado em diferentes tipos e o refinador precisa avaliar economicamente o seu processamento em um dado esquema de refino para o atendimento a um mercado consumidor. Para efetuar a escolha do elenco mais

adequado, é necessário avaliar a facilidade de movimentação e processamento, assim como o potencial produtivo dos petróleos disponíveis, qualificando-os de acordo com determinados critérios.

Características intrínsecas ao petróleo, por exemplo, quanto ao seu transporte e armazenamento para avaliar as características de escoamento, acidez e estabilidade à estocagem. Ou quanto ao seu processamento, analisando-os quanto aos contaminantes que interferem negativamente nos processos de refino.

Critérios qualitativos que indicam a adequação do petróleo à produção dos diversos derivados com base na sua composição em termos de hidrocarbonetos. Um petróleo com alto teor de saturados indica a adequação à produção de óleo diesel e de querosene de aviação, por exemplo.

Critérios quantitativos que o classifica de acordo com os rendimentos dos derivados a serem produzidos. Através de procedimentos analíticos é possível determinar as propriedades físicas que influenciam esses rendimentos. A densidade, por exemplo, se constitui no primeiro indicativo do potencial de produção de frações de alto valor agregado. A pressão de vapor, o ponto de fluidez e a viscosidade por outro lado preveem as dificuldades ligadas ao armazenamento, transporte e processamento do óleo cru.

A caracterização química também é importante para definir a adequação de um petróleo à produção dos combustíveis líquidos com a demanda de mercado e o esquema de refino disponível. Teores de enxofre e nitrogênio são indicativos do grau de refino necessário para o processamento do petróleo. O índice de acidez total por sua vez indica a possibilidade de ocorrer corrosão em equipamentos e tubulações. Já os teores de água e sal determinam a quantidade de contaminantes que causam problemas de corrosão (devida aos cloretos) e incrustação (devida aos sulfatos e carbonatos) nos equipamentos.

2.2 DERIVADOS DO PETRÓLEO

A diferença entre uma fração e um derivado do petróleo é que uma fração pode não apresentar todas as características necessárias a um derivado de petróleo, de acordo com as especificações vigentes, enquanto o derivado é composto por frações que, depois de misturadas apresentam, obrigatoriamente, todas essas características.

Os derivados do petróleo podem ser divididos em duas classes principais:

1. Combustíveis ou energéticos:
 - a. de uso doméstico: gás liquefeito de petróleo e querosene iluminante;
 - b. automotivos: gasolina e óleo diesel;
 - c. de aviação: gasolina e querosene;
 - d. industriais: gás combustível e óleo combustível;
 - e. marítimos: óleo diesel e óleo combustível.
2. Não combustíveis ou não energéticos:
 - a. óleos lubrificantes e parafinas;
 - b. matérias-primas para petroquímica e fertilizantes: gases, nafta e gasóleo;
 - c. produtos especiais: solventes, óleo para pulverização agrícola, asfaltos, coque de petróleo, extrato aromático, entre outros.

2.2.1 Características dos derivados

A qualidade de um derivado de petróleo é definida de acordo com o desempenho desejado e é traduzida por propriedades, com os seus respectivos limites, sendo a maior parte delas estabelecida e controlada no Brasil pela ANP – Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. Assim, as especificações dos derivados visam garantir a sua comercialização, dentro de um padrão de qualidade mínimo.

A volatilidade é uma dessas características e indica a facilidade de vaporização do combustível. A combustão representa a qualidade de queima dos derivados energéticos e é traduzida pelo número de octanos no caso da gasolina, pelo número de cetano para o óleo diesel e pelo ponto de fuligem para o querosene. Outro ponto importante está relacionado à energia que pode ser aproveitada no processo de combustão definida pelo poder calorífico, que é a quantidade de calor liberada quando uma unidade de massa de combustível é queimada completamente em condições padrão.

A viscosidade é outra propriedade importante que representa a resistência do fluido ao escoamento. Esta é útil na avaliação da facilidade de nebulização do óleo diesel e dos óleos combustível na câmara de combustão e na capacidade de formação e manutenção do filme lubrificante. Além da viscosidade, estão nesse grupo as propriedades ligadas à facilidade de escoamento a baixa temperatura, que diferem entre si de acordo com o tipo de derivado e com sua utilização como, por exemplo, o ponto de congelamento, o ponto de entupimento e o ponto de fluidez.

A estabilidade química e térmica representam a resistência à degradação de um derivado de petróleo e pode ser representada pela tendência ao aumento da acidez e da viscosidade e à formação de gomas ou depósitos. Outras propriedades importantes dos derivados que devem ser destacadas são a corrosividade e a emissão de gases poluentes.

2.3 PROCESSOS DE REFINO

Como discutido anteriormente, as propriedades do petróleo, assim como a composição química por elas refletida, são parâmetros que variam amplamente com a localização geográfica do campo produtor. Além disso, para um mesmo campo, ocorrem ao longo do tempo variações nas propriedades do petróleo, associadas, no longo prazo, à maturidade da exploração do campo e, no curto prazo, às condições circunstanciais dos processos de produção do petróleo. Com base nesses fatos, pode-se ter como certo que não há dois petróleos idênticos, assim como um mesmo petróleo sofre modificações ao longo do tempo.

Assim, para que se tenha o pleno aproveitamento do potencial de utilização do petróleo, torna-se mandatário um cuidadoso planejamento das operações industriais requeridas para o fracionamento das moléculas de interesse, ou para a transformação de moléculas de baixo valor de venda em outras de mercado mais vasto e rentável. A capacidade de lidar com a variabilidade da matéria-prima e, ainda assim, maximizar os rendimentos de derivados de maior valor agregado será determinante para o resultado financeiro da refinaria.

Uma refinaria de petróleo não é uma unidade independente. Ela está inserida em um contexto industrial que condiciona suas decisões operacionais aos seguintes grupos de restrições:

- do ponto de vista da matéria-prima, são impostas restrições de disponibilidade e qualidade associadas aos campos produtores, concernentes à logística de recebimento (oleodutos, transporte marítimo, etc) e às características físico-químicas dos petróleos;

- do ponto de vista dos produtos de refino, existem as restrições de qualidade e quantidade requeridas pelos mercados consumidores, além de questões associadas à logística de distribuição.

Tais restrições não são permanentes, mas sujeitas a mudanças ao longo do tempo, em função de condicionantes como as cotações e a disponibilidade dos

petróleos, assim como da valoração e da demanda dos derivados. Isso faz com que as oportunidades de ganhos financeiros com o refino de petróleo estejam associadas à correta configuração de quais processos de refino compõem o parque industrial de uma determinada refinaria. A essa configuração dá-se o nome esquema de refino, cujo estabelecimento é feito a partir de um dado elenco de processos, os quais são arranjados de modo a proporcionar o rendimento desejado de derivados e a flexibilidade operacional adequada às condições previstas ao longo da vida útil da refinaria.

Uma refinaria pode ser classificada em três grupos, de acordo com o seu objetivo básico: produção de combustíveis, produção de óleos básicos lubrificantes e produção de matérias-primas para a indústria petroquímica de primeira geração. O primeiro grupo constitui a maioria dos casos, uma vez que a demanda por combustíveis é significativamente maior que a dos outros produtos. Para as refinarias que se encontram nessa categoria, é fundamental a produção em larga escala de frações destinadas à obtenção de GLP, gasolina, querosene de aviação, óleo diesel, óleo combustível e cimento asfáltico de petróleo. A maior parte das refinarias brasileiras encontra-se nesse grupo (ABADIE, 2002).

Os diversos tipos de processos de refino que podem constituir uma refinaria de petróleo são comumente classificados em função do tipo de transformação que agregam à corrente de entrada, constituindo os processos de separação, processos de conversão, processos de tratamento e processos auxiliares.

2.3.1 Processos de separação

Esses processos têm como objetivo fracionar o petróleo ou outra corrente intermediária da refinaria empregando um processo físico de separação, escolhido de acordo com as propriedades da corrente que se deseja fracionar. As propriedades mais comumente utilizadas são a diferença nos pontos de ebulição dos componentes ou a diferença de solubilidade desses componentes em um solvente.

Uma vez que não há reações químicas nesses processos, todas as moléculas presentes na corrente de carga da unidade estarão presentes no somatório das correntes de saída, sendo teoricamente possível reconstituir a carga a partir dos produtos.

O principal processo de separação do petróleo é a destilação, que consiste na separação de frações de hidrocarbonetos presentes no petróleo com base na

diferença de suas temperaturas de ebulição. Por ser extremamente versátil, a destilação é usada em larga escala em uma refinaria, assim como em toda a indústria química. As operações de destilação são realizadas em equipamentos específicos designados por torres (ou colunas) de destilação.

A unidade de destilação atmosférica fraciona o petróleo em correntes de GLP, naftas, querosene, gasóleos atmosféricos e resíduos atmosféricos. Essas correntes, na maior parte das vezes, necessitam passar por processos adicionais antes de serem enviadas para tanques de armazenamento.

A unidade de destilação a vácuo fraciona a corrente menos volátil oriunda da unidade de destilação atmosférica, o resíduo atmosférico, em correntes de gasóleo de vácuo e resíduo de vácuo. Essas correntes são matérias-primas para outras unidades de processo da refinaria ou, no caso do resíduo de vácuo, este, após acerto de viscosidade, pode ser enviado para tanque de armazenamento de óleo combustível.

2.3.2 Processos de conversão

Esse grupo de processo se distingue dos processos físicos por promoverem reações químicas com o objetivo de obter misturas de hidrocarbonetos que possuam maior interesse econômico. As reações são promovidas mediante a ação conjugada da temperatura e da pressão, na presença do meio reacional conveniente. Em muitos são empregados catalisadores específicos para cada tipo de reação, que são substâncias que possuem ação determinante no aumento da velocidade com que as reações ocorrem. Os processos que deles fazem uso são conhecidos como processos catalíticos, em oposição aos não catalíticos ou térmicos, nos quais a reação ocorre sob efeito apenas das condições adequadas de temperatura, pressão e tempo de reação.

Os processos de conversão são, geralmente, de elevada rentabilidade, principalmente quando transformam frações de baixo valor comercial (gasóleos de vácuo e resíduos) em outras de maior valor (GLP, naftas, querosene, óleo diesel e lubrificantes). Nesses casos, são classificados como “processos de fundo de barril”, porque permitem um maior aproveitamento do petróleo, com a mínima produção de óleo combustível e asfalto. Embora apresentem elevados investimentos para suas implantações, usualmente o tempo de retorno do capital investido nos processos de conversão é baixo, comparando aos processos de separação física (ABADIE, 2002).

A reforma catalítica é um dos principais processos de conversão e tem por objetivo transformar uma nafta rica em hidrocarbonetos parafínicos ou naftênicos em outra rica em hidrocarbonetos aromáticos. O processo emprega alta temperatura (em torno de 500°C), pressões que variam dependendo da tecnologia empregada e um catalisador à base de metais nobres como, por exemplo, platina e rênio. O processo pode ter dois objetivos: produção de gasolina de elevado número de octano ou a produção de hidrocarbonetos aromáticos leves (benzeno, tolueno e xileno).

O principal produto do processo é a nafta rica em hidrocarbonetos aromáticos (reformado), mas também gera, em menores quantidades, gás combustível, GLP e uma corrente rica em hidrogênio. Essa corrente é, em alguns países europeus, a principal fonte de hidrogênio, insumo para as unidades de hidrotreatamento.

2.3.3 Processos de tratamento

Esses processos são utilizados para melhorar a qualidade dos derivados, por isso são também conhecidos como processos de acabamento. Assim como os processos de conversão, eles são de natureza química, embora seus objetivos não sejam provocar profundas modificações nas frações, mas sim eliminar os contaminantes presentes e estabilizar quimicamente o produto final.

As quantidades e os tipos de impurezas existentes nos produtos são bastante variáveis diferindo conforme o tipo de petróleo e o processo que os produziu. No entanto, pode-se afirmar que a quantidade de impurezas é significativamente maior nas frações mais pesadas do petróleo, dificultando a sua remoção. Por isso, para as frações mais leves, são empregados processos de tratamento chamados de convencionais, que não requerem condições operacionais severas e são relativamente mais simples em termos de equipamentos e de operação. Esses processos são usados, principalmente, para a redução do teor de enxofre dessas frações e conseqüentemente eliminação da corrosividade.

Para a adequação da qualidade de frações leves e médias (naftas, querosene e diesel) ou pesadas (gasóleos, lubrificantes e resíduos), esses processos mencionados anteriormente mostram-se ineficazes para a real remoção dos contaminantes. É necessário, então, lançar mão dos processos de hidrotreatamento, de maior eficiência, mas que operam em condições mais severas de temperatura e pressão, apresentando custos operacionais mais elevados e necessitando de

maiores investimentos. Em função das exigências ambientais de uma expressiva redução de contaminantes nos produtos, esses processos tornam-se imprescindíveis ao refino moderno.

Além da redução de enxofre, o hidrotratamento (HDT) pode ser utilizado para a saturação de hidrocarbonetos oleofínicos (estabilização) e aromáticos (aumento do número de cetano) e para a remoção de outros contaminantes como o nitrogênio, o oxigênio e os metais, dependendo do tipo de carga e do objetivo do tratamento. Sua viabilidade industrial para o tratamento de derivados do petróleo se tornou mais expressiva a partir de 1950, com a disponibilidade de hidrogênio, subproduto da reforma catalítica (JONES et al., 2006).

O uso intensivo de processos de hidrotratamento foi fortemente impulsionado nos últimos anos devido a três fatores importantes:

- a pressão da sociedade para a melhoria da qualidade do ar, exigindo derivados, principalmente gasolina e óleo diesel, com menores teores de enxofre, para menor emissão de poluentes (SO_3);

- a constatação da descoberta de petróleos cada vez mais pesados, com teores mais elevados de contaminantes, que estão sendo processados nas refinarias em todo o mundo;

- o custo da geração de hidrogênio, que se tornou menor nos dias de hoje devido à maior escala das atuais plantas de geração e ao uso do gás natural como matéria-prima, em substituição à nafta.

O hidrotratamento pode ser aplicado em quase todas as frações de petróleo, desde a nafta até as frações residuais. Em 2003 já existiam 1316 unidades implantadas no mundo inteiro (DOLBEAR et al., 2007) e até 2009 a capacidade instalada dessas unidades aumentou 60,7%, crescimento que não encontra correspondência em outros processos de refino (SILVY, 2010).

2.4 PLANEJAMENTO DA PRODUÇÃO

Quando se fala em rede logística do petróleo refere-se ao suprimento de matéria prima das plantas de produção de petróleo e gás para as refinarias e à distribuição dos produtos obtidos nessas refinarias para comercialização. Neste contexto, o papel da logística é produzir os fluxos de materiais certos, nos tempos certos, com o uso efetivo e eficiente das instalações.

A determinação das quantidades, qualidade e prazos de fornecimento de matérias primas, a programação das operações diárias das refinarias e da distribuição dos produtos faz parte do processo de planejamento da produção. A aquisição de matéria prima é decidida em função das previsões de mercado feitas pelo departamento comercial (qualidade e quantidade dos derivados), das capacidades de processamento disponíveis nas refinarias, terminais e modais de transporte e das ofertas de matéria prima (preço, qualidade e quantidade). A partir destas definições é feita a programação de compra e de entrega de matéria prima às refinarias.

No planejamento operacional são definidas as atividades e os meios necessários para suas execuções, num horizonte que pode ser desde poucos dias até muitos meses. Para Bueno (2003), com a capacidade de produção limitada e geograficamente dispersa (como é o caso da indústria do petróleo), fornecer mercadorias certas no instante e local necessários para a manufatura é crítico, e, portanto, a programação do fluxo de materiais é uma das principais decisões neste nível de planejamento.

Isto implica na necessidade de utilizarem-se diferentes modelos e técnicas no apoio à programação das atividades operacionais. As técnicas usadas na solução destes modelos geralmente caem nas categorias de otimização e/ou simulação.

Um modelo de otimização consta de uma função-objetivo a ser maximizada ou minimizada, sujeita a restrições que caracterizam o problema e que restringem os possíveis valores que as variáveis envolvidas podem assumir. Existem diversas técnicas de solução que são utilizadas segundo o tipo de problema com que se está trabalhando. Essas técnicas são a programação linear, a programação linear inteira mista, a programação não linear, a programação dinâmica e outras, conforme será detalhado nos capítulos a seguir.

No caso do planejamento operacional na indústria do petróleo, tem-se observado que a literatura técnica sobre o assunto aponta para o emprego da programação linear. Todos esses autores ressaltam a grande complexidade da indústria do petróleo em comparação com indústrias cuja linha de produção tem um produto principal e alguns subprodutos.

Ao descrever essa complexidade, Hartmann (1997) associa os fluxos envolvidos na indústria do petróleo a uma teia cheia de nós, onde cada nó representa a necessidade de uma tomada de decisão frente a um grande número de

possibilidades e recomenda a aplicação da PL, pois ela é indicada exatamente quando se deseja escolher a melhor possibilidade entre várias e têm-se limitações de recursos.

Outros autores estimam que uma margem extra de 1 dólar possa ser alcançada por barril do produto através de uma melhor implementação de sistemas de planejamento, programação e controle de processo de mistura da gasolina (Shobrys et al., 2002). Na comunidade científica, muitos resultados foram obtidos e têm promovido o desenvolvimento de métodos de otimização do planejamento de produção. Zhang et al. (2000) propôs uma nova estratégia de modelagem e decomposição para a otimização de refinaria. A estrutura geral do modelo de planejamento de uma refinaria foram propostos por Pinto et al. (2000). Eles enfatizaram a necessidade de considerar as condições de operação e as propriedades de entrada em modelos de programação de produção. No entanto, como modelar esses pontos permanece um problema em aberto. Mais recentemente, Shah et al. (2011) incorporou a logística para o problema de curto prazo de planejamento de produção de uma refinaria de grande escala, onde os produtos de saída da produção são tomados como variáveis a serem otimizadas, restringidas por limites pré-definidos. Gao et al. (2014) por sua vez considerou o impacto das variações do petróleo cru no planejamento da produção.

Após a descrição dos principais pontos do processo de refino de petróleo e da necessidade de se otimizar o planejamento da produção de ruma refinaria, é possível a apresentação do modelo proposto no próximo capítulo.

3. MODELAGEM PROPOSTA

Existem no mundo diversos países exportadores de petróleo, cada um com suas determinadas características, propriedades físicas e composição química. O Brasil, mesmo sendo um país exportador de petróleo, ainda precisa comprar óleo cru de outros países para atender algumas demandas internas. Devido à grande volatilidade dos preços de compra é importante sempre calcular qual a quantidade ideal de cada tipo de petróleo a ser comprada para obter o maior lucro possível. Esse é um problema clássico de planejamento e produção de uma refinaria de petróleo e irá ser estudado em detalhes a partir da modelagem de uma refinaria fictícia com capacidade de produção de 100.000 bbl/dia. Serão especificadas as operações unitárias envolvidas, capacidades de processamento, premissas, restrições ambientais e matérias-primas disponíveis. A descrição das condições de contorno e premissas segue a ordem de modelagem do problema e consideram a dependência das variáveis-chave.

Para isso, foi feita uma pesquisa bibliográfica sobre a indústria de petróleo observada no Capítulo 2 e, em seguida, reuniões com um Engenheiro Químico especialista em otimização de processos da Refinaria de Paulínia da Petrobrás – REPLAN. As reuniões realizadas foram muito importantes para verificar se as simplificações do modelo proposto faziam sentido e se, mesmo assim, o problema ainda se assemelhava ao de uma refinaria real.

3.1 MODELAGEM DO PROBLEMA

1) Oferta de Petróleo

Considerou-se que 11 tipos de petróleo crus mais conhecidos e utilizados mundialmente poderão ser comprados para suprir a demanda da refinaria estudada.

A estimativa do valor de mercado do barril baseou-se nos dados informados pelo órgão americano EIA (Energy Information Administration) em meados de 2015. Já as restrições de ofertas desses óleos foram obtidas a partir de estimativas observadas durante a pesquisa de campo. Na modelagem, assumiu-se que no valor já estão embutidos os custos de frete e seguro. Tipicamente, os preços dos petróleos são cotados em relação a petróleos de referência Brent, Maya e Árabe

Leve. A Tabela 3.1 lista os óleos crus elegíveis, a restrição de oferta e o valor de importação.

Tabela 3.1: Descrição dos petróleos internacionais disponíveis para compra.

Local	Petróleo	Restrição (bbl/dia)	Referência (\$/bbl)	Valor (\$/bbl)
Nigéria	Abo 3	Máximo 50.000	Brent - 3,00	107
	Brass river		Brent - 2,00	108
	Bonny light		Brent - 3,20	106,8
	Pennington		Brent - 3,10	106,1
Mar do norte	Brent	Máximo 10.000		110
México	Maya	Máximo 10.000		87
Venezuela	Merey 16	Máximo 20.000	Maya + 4,00	91
	Leona 24		Maya + 6,00	93
Argentina	Escalante	Máximo 30.000	Maya + 6,00	93
Arabia	Árabe leve	Máximo 25.000		96
	Árabe pesado		Árabe leve - 2,80	93,2

Importar ou não determinado tipo de óleo cru dependerá de sua disponibilidade e se esta escolha configurar a melhor solução para maximizar a função-objetivo do modelo.

2) Unidades de Processo

A refinaria em estudo tem seis unidades de processamento. Essas unidades foram escolhidas, pois são as que mais impactam a produção de derivados (destilação) ou influenciam a qualidade dos produtos (tratamento). A Tabela 3.2 apresenta quais unidades influenciarão a função objetivo.

Tabela 3.2: Unidades de Processo para o modelo em estudo.

Unidade de Processo	Representação
Unidade de Destilação Atmosférica e Vácuo	UDAV
Unidade de Hidrotratamento — Querosene	UHDTK
Unidade de Hidrotratamento – Diesel Leve	UHDTL
Unidade de Hidrotratamento – Diesel Pesado	UHDTP
Unidade de Hidrotratamento – Gasóleo Leve	UHDTG
Unidade de Reforma Catalítica – Nafta Pesado	UREF

Para simplificar a modelagem, os derivados que necessitam de hidrotratamento passam por uma unidade (UHDT) própria. Dessa maneira, é

possível discriminar e quantificar os custos operacionais de cada derivado separadamente. O detalhamento das correntes provenientes da unidade de destilação que passam pelas unidades de tratamento será descrito em seguida.

3) Capacidade de Processamento

Para estimar as capacidades das unidades de processo utilizaram-se as informações das capacidades nominais disponíveis para as refinarias nacionais. Como ponto de partida, considerou-se que a capacidade da Unidade de Destilação (UDAV) será 100.000 bbl/dia ou 16.000 m³/dia, valor próximo à capacidade da Refinaria Gabriel Passos, que é de 20.000 m³/dia (Petrobras, 2007).

A Tabela 3.3 mostra as capacidades, custo operacional e rendimento das Unidades de Hidrotratamento (UHDT) para o modelo proposto:

Tabela 3.3: Especificações das Unidades de Hidrotratamento (UHDT).

Unidade	Cap. Máx. (bbl/d)	Custo Operacional (US\$ / bbl)	Remoção Enxofre (% massa)
UHDTK	3.000	2,5	95,00%
UHDTL	8.000	5	99,90%
UHDTP	6.000	4,5	99,00%
UHDTG	5.000	4	95,00%

Foram utilizados cortes típicos na curva de destilação de cada tipo de petróleo, que podem ser observados no Apêndice C. Para as demais unidades, admitiu-se que as cargas processadas têm as mesmas características e rendimentos, independentemente dos petróleos de origem. Assim, os rendimentos são únicos e típicos, obtidos da literatura.

4) Demanda de mercado para derivados

Os produtos comercializáveis serão resultado de misturas de correntes que passaram pelas unidades de hidrotratamento ou reforma catalítica e correntes provenientes direto da destilação atmosférica. Para este estudo considerou-se 10 produtos finais comercializáveis.

As restrições de demanda para alguns dos derivados farão com que o algoritmo de otimização escolha a quantidade e o tipo de petróleo mais adequado para satisfazer a demanda de mercado. O valor de venda desses derivados foi uma estimativa baseada em dados mensais da Agência Nacional de Petróleo, Gás

Natural e Biocombustíveis (ANP) e os valores de demanda foram estimados com base na pesquisa de campo realizada. A Tabela 3.4 lista esses derivados, a demanda de mercado e preço de venda:

Tabela 3.4: Lista dos produtos finais comercializáveis.

Derivado	Representação	Demanda (bbl/dia)	Preço de Venda (\$/bbl)
Gás Liquefeito de Petróleo	GLP	Sem limite	65
Gasolina Comum	GASO	7000	102
Nafta Petroquímica	NPTQ	Sem limite	85
Querosene de Aviação	QAV	3000	135
Diesel S-10	S10	Sem Limite	132
Diesel S-500	S500	10.000	126
Diesel usinas termoelétricas	TFM	Sem limite	105
Asfalto	CAP	1000	80
Óleo Combustível Industrial	OCB1	Sem limite	90
Gasóleo Pesado de Vácuo	GPV	Sem limite	77

5) Especificação dos produtos

Os derivados de petróleo, da maneira como são produzidos, nem sempre estão enquadrados nas especificações requeridas. Faz-se necessário, muitas vezes, um processo de tratamento para especificar o produto, principalmente quanto ao teor de enxofre. A finalidade dos diversos processos de tratamento é eliminar os efeitos indesejáveis destes compostos, presentes em todos os derivados. Esses processos serão explorados mais adiante.

Para definir as especificações de qualidade dos derivados gasolina e diesel, levam-se em conta as orientações do Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA), constantes na Resolução CONAMA 415/2009, que define os limites de emissões dos poluentes veiculares da nova fase L-6 (veículos leves).

Segundo a resolução, a gasolina deve ter no máximo 50 mg/kg ou partes por milhão de enxofre (ppm), o que representa um valor muito baixo de enxofre. Na modelagem, considerou-se que a Unidade de Reforma Catalítica (UREF) irá retirar 100% do enxofre da corrente de nafta pesada proveniente da destilação.

Já para o diesel serão três especificações: o diesel S-10, com no máximo 10 ppm de enxofre (0,001% em massa), diesel S-500 com no máximo 500ppm de enxofre (0,005% em massa) e o TFM com máximo de 2000ppm (0,2% em massa) de enxofre.

Além destas características, haveria outras relacionadas ao desempenho do combustível, como é o caso do número de cetano e de uma faixa de densidade mais estreita para o diesel. Por simplificação, somente o teor de enxofre foi considerado como limitante à produção, por conta das unidades de hidrotreatamento necessárias ao atendimento das especificações.

Para os derivados cimento asfáltico de petróleo (CAP) e óleo combustível industrial (OCB) seguiu-se as normas da ANP – RESOLUÇÃO Nº 19 DE 11.07.2005 que restringe para o CAP um índice de viscosidade cinemática (50º) à uma faixa entre 400.000 cSt e 1.000.000 cSt.

Considerando que o CAP é um produto de base da torre de destilação, é inviável utilizar petróleos ricos em hidrocarbonetos mais leves, portanto restringiu-se os tipos de óleos crus elegíveis aos Maya, Merey 16, Leona 24 e Árabe Leve ou Árabe Pesado.

Para o OCB, a viscosidade a 50º deve estar entre 200 e 600 cSt, além de possuir um teor de enxofre de no máximo 1% em massa. A Tabela 3.5 resume as especificações técnicas consideradas para o modelo.

Tabela 3.5: Teor de enxofre e viscosidade para os produtos finais.

Derivado	Especificação
GLP	Sem especificações
GASO	Sem especificações
NPTQ	Sem especificações
QAV	Teor máximo de enxofre 0,05% massa
S10	Teor máximo de enxofre 0,001% massa
S500	Teor máximo de enxofre 0,05% massa
TFM	Teor máximo de enxofre 0,2% massa
CAP	Viscosidade mínima @50°C de 400.000 cSt e máxima de 1.000.000 cSt
OCB1	Viscosidade mínima @ 50°C de 200 cSt e máxima de 600 cSt. Enxofre máximo de 1% massa
GPV	Sem especificações

6) Formulação e representação do modelo de estudo

Os tópicos anteriores descreveram os limites do modelo. O objetivo deste é integrar todas essas variáveis e premissas de forma a estruturar a visão global do

processo com todas as correntes de entrada e saída, para que seja possível determinar através do balanço material, a função objetivo a ser maximizada.

É necessário definir os componentes dos produtos finais, considerando que esses serão uma mistura de correntes provenientes diretamente da unidade de destilação e correntes hidrotratadas ou reformadas. Na Tabela 3.6 estão representados os componentes de cada derivado comercializável.

Tabela 3.6: Componentes dos produtos finais comercializáveis.

Derivado	Componentes
GLP	GLP
GASO	NL + REF
NPTQ	NL + NP
QAV	KH + K
S-10	K + KH + DL + DLH
S-500	K + KH + DL + DLH + DPH
TFM	K + KH + DL + DLH + DP + DPH + GLV + GLVH
CAP	RV + GPV
OCB1	K + KH + DL + DLH + DP + DPH + GLV + GLVH + GPV + RV
GPV	GPV

Onde:

NL = nafta leve

NP = nafta pesada

K = querosene

DL = diesel leve

DP = diesel pesado

RV = Resíduo de vácuo

H = representação para corrente hidrotratada

Cada corrente representará uma variável do balanço de massa para composição da função-objetivo. Os cortes de cada tipo de petróleo serão apresentados mais adiante na etapa de equacionamento do modelo.

Figura 3.1 representa o fluxograma geral do modelo, com os processos e correntes envolvidas. Não estão contempladas no diagrama as restrições de rendimento e qualidade dos produtos finais.

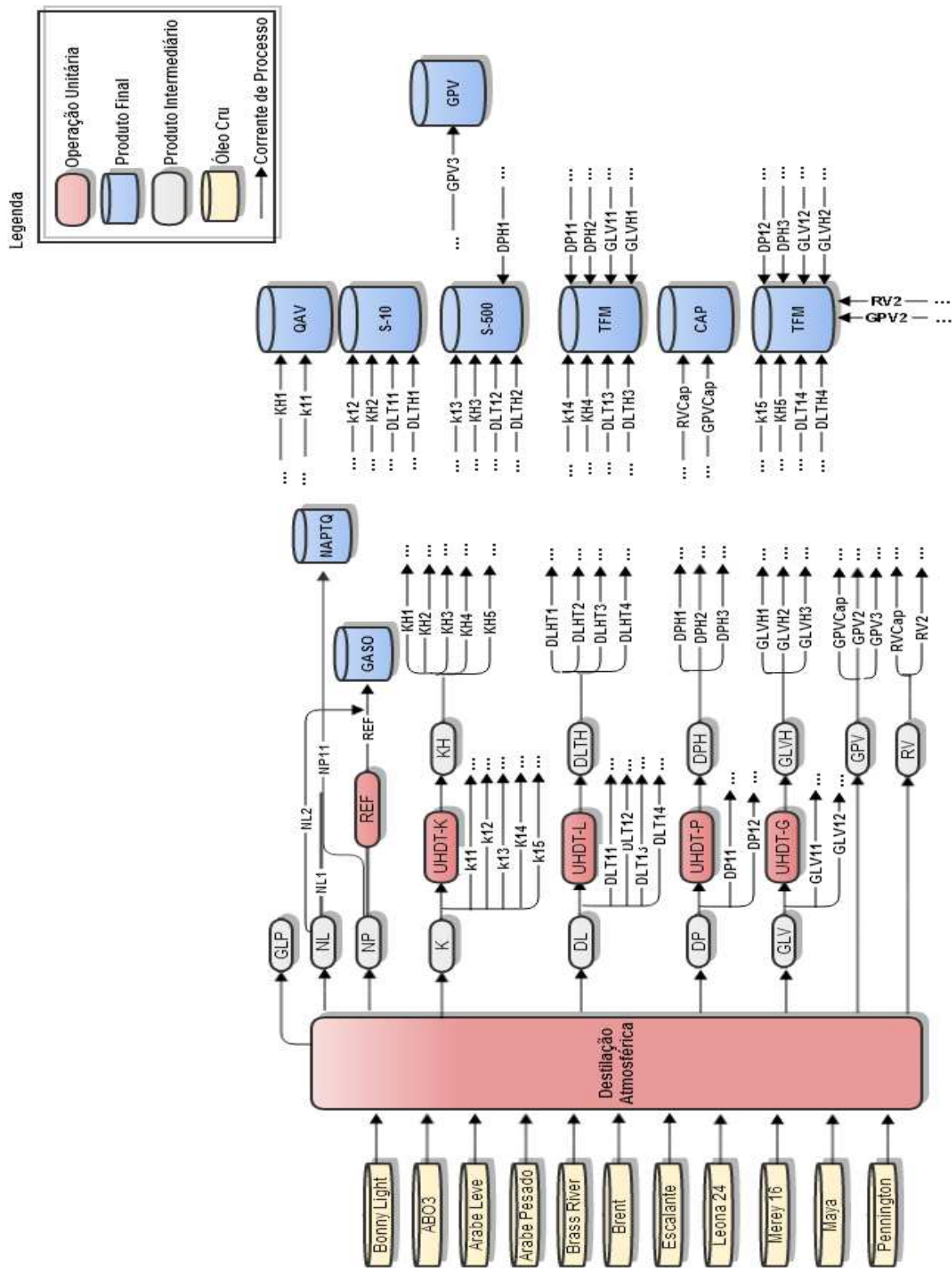


Figura 3.1: Diagrama esquemático do problema da Refinaria.

É importante destacar que as correntes não estão discriminadas por tipo de petróleo na Figura 3.1. Seriam nove cortes para cada um dos onze petróleos, que significa noventa e nove correntes no modelo só oriundas da destilação. Por exemplo, cada uma das onze naftas pesadas poderia gerar onze reformados distintos, ou onze querosenes hidrotratados diferentes, onze diesel leves e assim por diante.

Mesmo sendo um modelo simplificado haveria quase 200 correntes distintas. No mundo real, onde há ofertas de aproximadamente 150 petróleos, o número de cortes seria muito superior aos nove cortes simplificados, e o número de correntes no modelo dispararia, chegando aos milhares, o que torna praticamente impossível administrar todas as possibilidades.

Não se trata de uma boa prática a refinaria dispor de onze tanques distintos para armazenar o diesel pesado de cada um dos onze petróleos. Idem para os demais derivados. A configuração usual das refinarias são os chamados *pools* de armazenamento. Por exemplo, em um mesmo tanque de diesel pesado (DP), misturam-se os DPs dos onze petróleos de origem, se for o caso. A qualidade desse *pool* de DP dependerá, obviamente, dos petróleos que os originaram. Se o *pool* de DP for rico em DP oriundo do petróleo ABO3, o enxofre desse *pool* será próximo de 0,013%, que é quantidade de enxofre do DP do ABO3. Por outro lado, se o *pool* for rico em petróleo Maya, o teor de enxofre aumenta para 0,112%. São esses *pools* que existem de fato em uma refinaria real. São eles que devem ser misturados para produzir os derivados GLP, GASO, NPTQ, S10 e assim por diante.

Dessa forma, o modelo terá de abastecer os *pools* de GLP, NL, NP, K, DL, DP, GLV, GPV e RV antes de compor as misturas ou como cargas das unidades de reforma ou hidrotratamento. A Figura 3.2 exemplifica o *pool* de NP que alimentará a UREF e produzir REF.

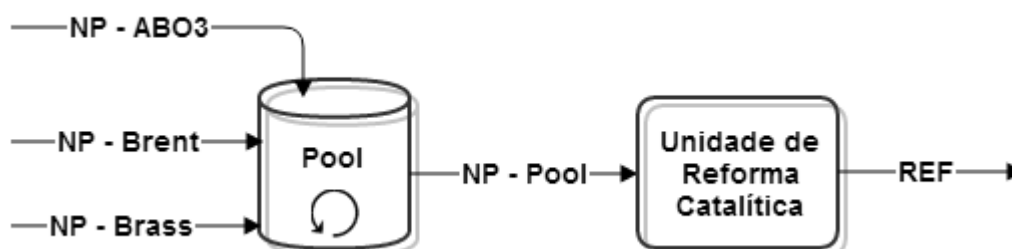


Figura 3.2: Diagrama esquemático para o *pool* de Nafta Pesada (NP).

7) Equacionamento da função objetivo

Um modelo para refinaria geralmente é configurado com uma única função objetivo para maximizar o lucro, conforme descrito por Sahdev (2010):

Maximizar $\{\sum(\text{valor do Produto}) - \sum(\text{custo Matéria-prima}) - \sum(\text{custos de produção})\}$ sujeita a várias restrições definidas no modelo.

Para o caso estudado a função objetivo final será:

Lucro = (Venda 10 derivados) – [Compra de Petróleo + Operação UDAV + Operação REF + Operação (UHDTK + UHDTL + UHDTP + UHDTG)], sujeito às restrições de capacidade das unidades de processamento, demanda de mercado, oferta de petróleo e especificação do produto final.

- Balanço de massa para correntes de mistura

Para realizar o balanço de massa é necessário conhecer o corte de cada tipo de petróleo para os principais produtos da unidade de destilação. A tabela com essa informação encontra-se no Apêndice C deste trabalho.

Definiu-se a convenção de que a corrente que passou pela UREF será chamada de REF e as correntes que passarem por alguma unidade de hidrotratamento terão o sufixo H na nomenclatura, como pode ser observado na Figura 3.3.

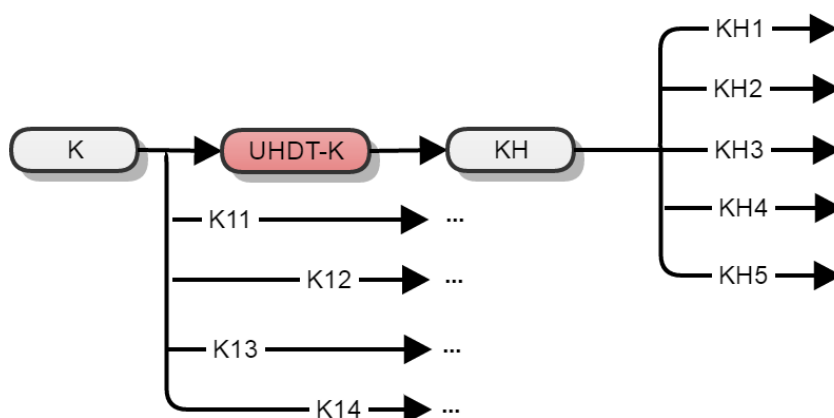


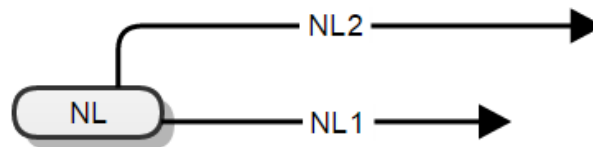
Figura 3.3: Convenção para nomenclatura das correntes.

A partir da premissa de que a variação da densidade dos hidrocarbonetos não é significativa, considerou-se que o volume é aditivo em volume, isto é, 1 m³ de um

“hidrocarboneto A” com 1 m³ de “hidrocarboneto B” formarão 2 m³ de um “derivado C”. Sendo assim, o balanço de massa é simplificado para um balanço de volume. Segundo informações obtidas nas reuniões da REPLAN, essa é uma simplificação adotada também na indústria de refino de petróleo.

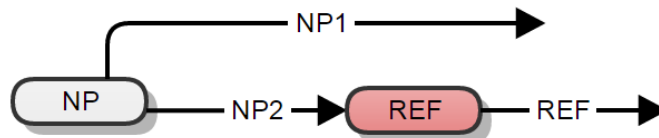
Nas equações 3.1 a 3.18, apresenta-se o balanço das correntes de mistura que formarão cada derivado final a ser comercializado:

- Nafta Leve (NL)



$$NL = NL1 + NL2. \quad (3.1)$$

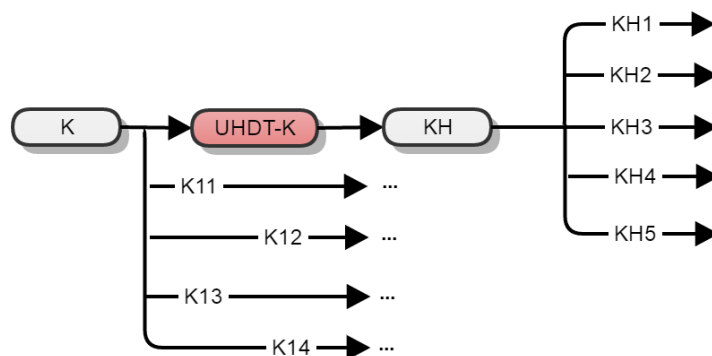
- Nafta Pesada (NP)



$$NP = NP1 + REF. \quad (3.2)$$

$$NL = REF * 2,5. \quad (3.3)$$

- Querosene (K)

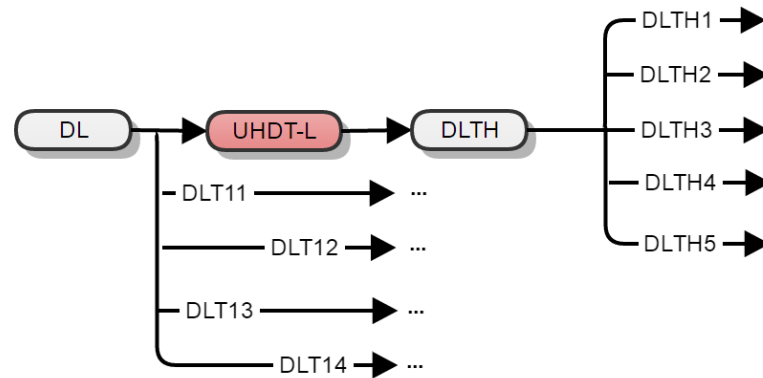


$$K = K1 + KH. \quad (3.4)$$

$$K1 = K11 + K12 + K13 + K14 + K15. \quad (3.5)$$

$$KH = KH1 + KH2 + KH3 + KH4 + KH5. \quad (3.6)$$

- Diesel Leve (DL)

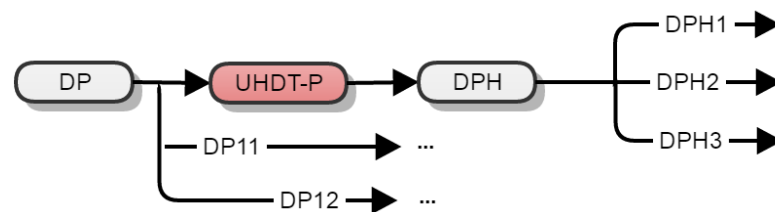


$$DL = DL1 + DLH. \quad (3.7)$$

$$DL1 = DL1 + DL2 + DL3 + DL4. \quad (3.8)$$

$$DLH = DLH1 + DLH2 + DLH3 + DLH4. \quad (3.9)$$

- Diesel Pesado (DP)

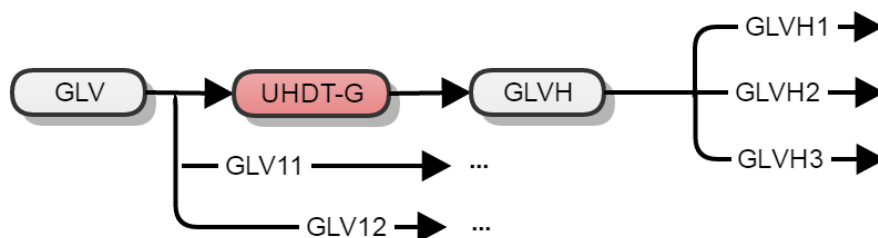


$$DP = DP1 + DPH. \quad (3.10)$$

$$DP1 = DP11 + DP12. \quad (3.11)$$

$$DPH = DPH1 + DPH2 + DPH3. \quad (3.12)$$

- Gasóleo Leve (GLV)

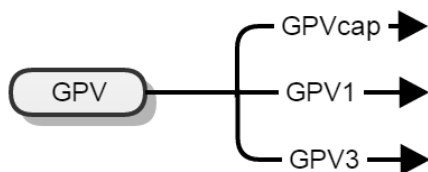


$$GLV = GLV1 + GLVH. \quad (3.13)$$

$$GLV1 = GLV11 + GLV12. \quad (3.14)$$

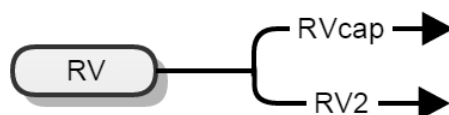
$$GLVH = GLVH1 + GLVH2 + GLVH3. \quad (3.15)$$

- Gasóleo Pesado (GPV)



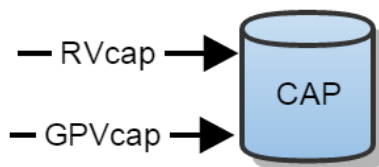
$$GPV = GPV1 + GPVcap + GPV3. \quad (3.16)$$

- Resíduo de Vácuo (RV)



$$RV = RV2 + RVcap. \quad (3.17)$$

- Cimento Asfáltico de Petróleo (CAP)



$$CAP = RVcap + GPVcap. \quad (3.18)$$

Há um *pool* especial ($pool_{CAP}$) criado para atender à restrição dos tipos de petróleo elegíveis para formação do CAP. Este *pool* pode receber apenas correntes provenientes dos petróleos Maya, Merrey, Árabe Leve e Árabe Pesado.

- Cálculo dos custos

O cálculo dos gastos com a importação de óleo cru foi feito da seguinte forma:

- Gasto por óleo cru:

$$\$Compra_{petróleo X_n} = Volume_{Petróleo X_n} \left(\frac{bbl}{dia} \right) \times Preço_{Petróleo X_n} \left(\frac{US\$}{bbl} \right) \quad (3.19)$$

- Gasto total:

$$\$Compra_{Total} = \sum_{n=1}^{n=16} \$Compra_{Petróleo X_n} \quad (3.20)$$

O cálculo do custo da UDAV segue a seguinte equação:

$$\$Custo_{UDAV} = Custo \left(\frac{US\$}{bbl} \right) \times Volume_{processado} \left(\frac{bbl}{dia} \right) \quad (3.21)$$

- Para um óleo cru:

$$Pool_m = \sum_{i=1}^{i=n} Volume_{Petróleo X_n} \times \% Corte_{n,m} \quad (3.22)$$

Onde:

$m = \{GLP, NL, NP, K, DL, DP, GNV, GPV_{CAP}, GPV, RV_{CAP}, RV\}$

$Petróleo X_n = \{ABO3, Brass River, Bonny Light, Pennington, Brent, Maya, Merey 16, Leona 24, Escalante, Árabe Leve, Árabe Pesado\}$.

$\% Corte_{n,m} = (\text{Valor tabelado do corte do derivado } m \text{ para o petróleo } X_n) / 100$

O cálculo do custo da UREF segue a seguinte equação:

$$\$Custo_{UREF} = Custo \left(\frac{US\$}{bbl} \right) \times Volume_{N2} \left(\frac{bbl}{dia} \right) \quad (3.23)$$

O cálculo do custo da UREF segue a equação:

$$\text{\$Custo}_{UHDTX} = \text{Custo} \left(\frac{\text{US\$}}{\text{bbl}} \right) \times \text{Volume}_X \left(\frac{\text{bbl}}{\text{dia}} \right) \quad (3.24)$$

Onde $X \in \{K_2, DL_2, DP_2, GLV_2\}$

- Venda dos derivados

A composição dos derivados finais dependerá dos petróleos internacionais que o otimizador selecionar e do valor percentual do rendimento em volume que o petróleo fornece para cada corte, de acordo com suas características.

O preço de venda de um determinado derivado foi estimado a partir dos valores praticados no mercado brasileiro. Assim, o ganho total será obtido pela seguinte fórmula:

$$\text{\$Ganho Total}_X = \text{\$Venda}_X \left(\frac{\text{US\$}}{\text{bbl}} \right) \times \text{Volume}_{total\ x} \left(\frac{\text{bbl}}{\text{dia}} \right) \quad (3.25)$$

Onde $X \in \{GLP, GASO, NPTQ, QAV, S-10, S-500, TFM, CAP, OCB1, GPV\}$

E Volume_{Total} é dado por:

$$\text{\$Volume Total}_X = \sum \text{Volume}_Y \left(\frac{\text{bbl}}{\text{dia}} \right) \times \% \text{Rendimento}_{corte} \quad (3.26)$$

Onde Y será a seleção otimizada dos tipos de petróleos crus. E o rendimento de cada derivado X é obtido da tabela presente no apêndice C.

8) Restrições do problema

- Oferta de petróleo internacional

Como dito anteriormente, a oferta de petróleos crus será ilimitada, portanto a solução ótima do problema deve considerar a limitação de oferta de compra. Para modelagem, cada opção de óleo cru será uma variável. Também foi nomeada uma variável diferente por petróleo elegível à formação de CAP (Asfalto). A Tabela 3.7 mostra as variáveis e as restrições de oferta.

Tabela 3.7: Representação dos óleos crus para o modelo.

Petróleo	Variável (bbl)
ABO 3	X1
BRASS RIVER	X2
BONNY LIGHT	X3
PENNINGTON	X4
BRENT	X5
MAYA	X6
MAYA CAP	X7
MEREY 16	X8
MEREY 16 CAP	X9
LEONA 24	X10
LEONA 24 CAP	X11
ESCALANTE	X12
ÁRABE LEVE	X13
ÁRABE LEVE CAP	X14
ÁRABE PESADO	X15
ÁRABE PESADO CAP	X16

Restritos à:

$X1 + X2 + X3 + X4$	< 50.000	Oferta de petróleo Nigeriano
X5	< 10.000	Oferta de petróleo do Mar do Norte
$X6 + X7$	< 10.000	Oferta de petróleo Mexicano
$X8 + X9 + X10 + X11$	< 20.000	Oferta de petróleo Venezuelano
X12	< 30.000	Oferta de petróleo Argentino
$X13 + X14 + X15 + X16$	< 25.000	Oferta de petróleo Árabe

- Demanda de Mercado

Considerando que cada derivado é fruto de uma mistura de correntes que saem das unidades de destilação e de tratamento, a demanda de mercado pelos diferentes tipos de derivados terá um impacto importante na solução ótima e na escolha dos óleos crus a serem utilizados. Considerando as capacidades que se assumiu para essa refinaria, trabalhar-se-á inicialmente com a seguinte restrição de demanda, apenas para GASO, QAV, S-500 e CAP:

GASO ≤ 7.000 (bbl/dia)

QAV ≤ 3.000 (bbl/dia)

S-500 ≤ 10.000 (bbl/dia)

CAP ≤ 1.000 (bbl/dia)

- Capacidades das unidades de destilação e tratamento

A capacidade de processamento de cada unidade de operação também irá influenciar no resultado ótimo para o planejamento de produção, dessa forma, estipulou-se que as restrições de processamento serão:

Corrente K2	≤ 3.000	Capacidade UHDTK
Corrente DL2	≤ 8.000	Capacidade UHDTL
Corrente DP2	≤ 6.000	Capacidade UHDTP
Corrente GLV2	≤ 5.000	Capacidade UHDTG

$$\sum_{i=1}^{16} X_i \leq 100.000 \quad \text{Capacidade UDAV}$$

Onde, i = tipo de óleo cru importado e X = volume de óleo cru (bbl/dia).

- Restrições de Qualidade/Ambientais

As restrições de qualidade já mencionadas anteriormente trazem para a modelagem as especificações usuais para o mercado nacional e traz uma questão importante que é não linearidade da viscosidade quando calculada para todo conjunto de óleos crus. Esse é um problema muito comum que terá que ser resolvido com manipulações matemáticas para linearizar os termos não lineares.

a) Viscosidade e Índice de Viscosidade

A restrição de viscosidade será aplicada ao CAP (Asfalto) e ao OCB (Óleo Combustível Industrial). O asfalto pode estar exposto às condições de alta e baixa

temperatura, esperando-se dele um comportamento o mais uniforme possível em relação à viscosidade.

A propriedade que mede o inverso da variação da viscosidade com a variação da temperatura é chamada de índice de viscosidade (IV). Quanto maior o IV, menor a variação da viscosidade com a temperatura. (Abadie, 2002).

Neste modelo a viscosidade (ν) aditiva em volume será considerada:

$$\text{CAP} \quad 400.000 < \nu < 1.000.000 \text{ cst à } 50^\circ\text{C}$$

$$\text{OCB} \quad 200 < \nu < 600 \text{ cst à } 50^\circ\text{C}$$

O índice de viscosidade em função da temperatura é dado por:

$$IV = \frac{\ln \nu}{\ln(1000 \times T)} \quad (3.27)$$

Dessa forma, as restrições ficam:

$$\text{CAP} \quad 0,65 < IV < 0,75$$

$$\text{OCB} \quad 0,43 < IV < 0,48$$

As informações de viscosidade a 50°C estão disponíveis juntamente com as informações dos cortes para cada óleo cru importado no Apêndice C, assim, o índice de viscosidade a ser considerado, seria um índice médio, ponderado pelos óleos selecionados como demonstrado na equação 3.28.

$$\bar{IV} = \frac{\sum_{i=1}^n IV_i \times V_i}{\sum_{i=1}^n V_i} = \sum_{i=1}^n IV_i \times x_i \quad (3.28)$$

Onde x_i é a fração volumétrica do componente i .

b) Enxofre (% massa)

Eliminar o enxofre dos derivados é essencial, pois esta impureza confere às frações de produtos propriedades indesejáveis, tais como, corrosividade, acidez, odor desagradável, formação de compostos poluentes, alteração de cor, etc.

A restrição do enxofre será aplicada aos derivados: QAV, S-10, S-500, TFM e OCB:

S QAV	<= 0,05 % em massa
S S-10	<= 0,001% em massa
S S-500	<= 0,05 % em massa
S TFM	<= 0,2 % em massa
S OCB	<= 1 % em massa

É necessário expressar as frações em massa e não em volume. Para isso, multiplica-se os termos pela densidade específica de cada óleo cru, passando então a fazer todas as manipulações com o termo em massa, conforme equação 3.29.

$$\overline{\%S} = \frac{\sum_{i=1}^n \%S_i \times V_i \times \rho_i}{\sum_{i=1}^n (V_i \times \rho_i)} \quad (3.29)$$

- Restrição de lucro da Refinaria

Busca-se de uma condição em que o lucro por barril é de pelo menos \$5,00 a um custo operacional de pelo menos \$3,00 dólares. A capacidade da refinaria deve estar idealmente próxima de 100.000 bbl/dia.

Depois de feita a modelagem do problema, é necessário definir qual técnica será utilizada para resolução e otimização desse problema. No Capítulo 3 a seguir é feita uma revisão teórica e bibliográfica das técnicas de otimização para auxiliar nessa escolha.

4. OTIMIZAÇÃO

A indústria química passou por grandes mudanças nos últimos 40 anos. A instabilidade nos preços de energia e de matéria prima, induzida principalmente pela crise do petróleo na década de 70, mostrou que era preciso produzir com mais tecnologia e com menos dependência energética. Maiores preocupações em relação ao impacto da produção industrial na segurança dos trabalhadores e no meio ambiente também vieram à tona a partir dessa época. Além disso, a competição por preço e qualidade dos produtos ficava cada vez mais acirrada. (Perkins, 2003)

Uma das ferramentas mais importantes da engenharia utilizada para solucionar essas novas questões é a otimização. Segundo Himmelblau et al. (2001), a otimização é o uso de métodos específicos para determinar o melhor custo benefício e uma solução eficiente para um problema ou projeto de um processo. Essa técnica é a ferramenta quantitativa mais usada na indústria para ajudar nas tomadas de decisão. Uma extensa variedade de problemas de projeto, construção, operação e análise de plantas químicas, bem como muitos outros processos industriais, pode ser resolvido por otimização.

A otimização permeia os campos da ciência, engenharia e administração. Na física, muitos princípios ótimos que descrevem fenômenos naturais nos campos da ótica e mecânica clássica foram enunciados. A estatística possui princípios chamados de máxima probabilidade, perda mínima e mínimos quadrados. Já a administração frequentemente utiliza os conceitos de máximo lucro, custo mínimo, uso máximo dos recursos e esforço mínimo.

Problemas típicos da engenharia química, no projeto ou na operação de uma planta, têm muitas soluções. A otimização consiste em escolher a melhor dentro do conjunto possível, segundo um critério especificado, através de métodos quantitativos eficientes. Softwares específicos tornam essa tarefa possível e viável economicamente. Porém, para obter informações úteis dos computadores é necessária uma análise profunda do processo em questão, compreensão dos objetivos desejados e, normalmente, experiência previa.

Os benefícios adquiridos pelo uso dessas técnicas são muitos: aumento de desempenho, aumento da quantidade de produtos de interesse, redução da quantidade de contaminantes, redução do consumo de energia, redução do tempo de parada, redução do custo de manutenção, redução do desgaste de equipamentos

e melhor utilização de pessoal. Além disso, apenas a identificação do objetivo, restrições e graus de liberdade do sistema trazem benefícios não mensuráveis como, por exemplo, aumento da qualidade de projeto, maior confiança na solução de problemas e tomadas de decisão mais rápidas.

No entanto, cada problema tem uma característica particular que o enquadra em determinado tipo de problema de otimização. Por isso, é extremamente importante conhecer as diferentes classificações existentes para poder escolher o método ideal para a sua resolução.

4.1 CLASSIFICAÇÕES

Como pode ser observado na Figura 4.1, os problemas de otimização podem ser classificados primeiramente em termos de variáveis discretas ou contínuas. A maioria dos problemas de otimização contínua abrange a programação linear (PL) e a programação não linear (PNL). Já os problemas discretos são classificados em programação linear inteira mista (PLIM), em programação não linear inteira mista (PNLIM) ou ainda no caso particular em que todas as variáveis são inteiras (PI) (Biegler et al., 2004).

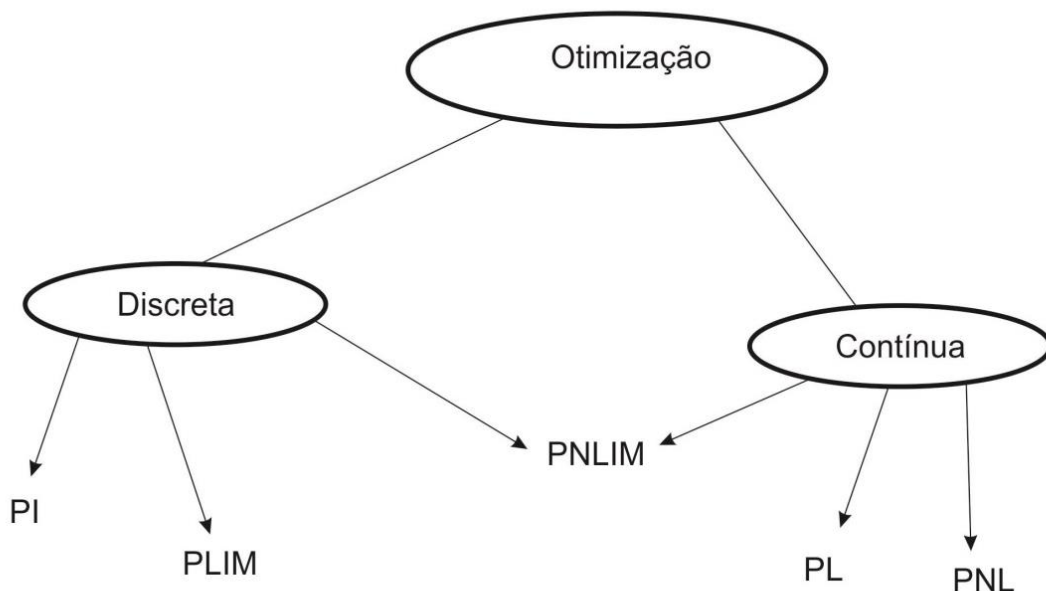


Figura 4.1: Classificações dos problemas de otimização. (FONTE: Adaptado de BIEGLER et al., 2004)

Com relação à sua formulação, problemas de otimização discreta ou contínua quando apresentadas na sua forma algébrica, possuem a seguinte forma geral:

$$\min Z = Q(x, y) \begin{cases} h(x, y) = 0 \\ g(x, y) \leq 0 \\ x \in X, y \in \{0,1\} \end{cases}$$

Onde $Q(x,y)$ é a função objetivo, $h(x,y)$ e $g(x,y)$ são as restrições do problema. $h(x,y)$ são as equações que descrevem a performance do sistema como, por exemplo, balanços de massa e energia, e $g(x,y) \leq 0$ são as inequações que definem as especificações do problema. As variáveis x são contínuas e normalmente correspondem a variáveis de estado enquanto as variáveis y são discretas, logo, restritas a 0 e 1.

Os problemas de programação inteira mista (PIM) podem ser classificados de duas formas: correspondem a problemas de programação não linear inteira mista (PNLIM) quando qualquer uma das funções envolvidas é não linear e se todas as funções são lineares, se trata de um problema de programação linear inteira mista (PLIM). Caso não haja nenhuma variável inteira, o PIM se reduz a um PL ou a um PNL, dependendo se há ou não variáveis não lineares.

De acordo com Grossmann et al. (2004), importantes avanços foram obtidos nessas áreas citadas anteriormente. No entanto, grandes questionamentos ainda precisam ser resolvidos, principalmente no que se diz respeito a métodos eficientes para resolver problemas de otimização sob incertezas. A chamada otimização global em problemas não convexos também é ainda um grande desafio na otimização não linear e a otimização baseada em lógica é uma promissora técnica para resolver problemas discretos de forma mais eficiente. É preciso ainda avançar em campos da ciência da computação e engenharia de software para que seja possível desenvolver força computacional suficiente para resolver problemas de ordem de magnitude superior ao que é possível atualmente.

4.2 PROGRAMAÇÃO LINEAR

Segundo Bregalda et al. (1983), o objetivo desse campo de estudo é a maximização ou minimização de uma função linear, chamada de função objetivo, respeitando-se um sistema linear de igualdades ou desigualdades que recebem o nome de restrições do modelo. Essas restrições representam normalmente

limitações de recursos disponíveis como, por exemplo, capital, mão-de-obra, fatores de produção ou, ainda, exigências e condições que devem ser cumpridas no problema. O conjunto de soluções viáveis é determinado a partir dessas restrições impostas pelo problema, sendo a melhor das soluções viáveis, isto é, aquela que maximiza ou minimiza a função objetivo chamada de solução ótima.

O desenvolvimento de um método (ou algoritmo) que determine a solução de um problema de programação linear (PPL) torna necessária a redução do problema a uma forma que permita a aplicação direta desse algoritmo. No caso de programação linear, o algoritmo mais utilizado é o *SIMPLEX*. Para que esse método possa ser aplicado, é necessário reduzir o problema à forma padrão, que pode ser representado da forma abaixo, onde o primeiro conjunto de equações representa as restrições do PPL, o segundo é a condição de não negatividade e a última equação a função objetivo.

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, \text{ onde } b_i \geq 0 \\ x_j \geq 0 \\ \sum_{j=1}^n c_{ij}x_j = Q(x) \rightarrow MIN \end{cases}$$

Nos casos em que o problema não estiver na forma padrão, existem algumas técnicas que podem ser aplicadas:

1. Ocorrência de desigualdades

Qualquer inequação linear pode ser transformada em uma equação se forem subtraídas ou adicionadas variáveis positivas ou negativas, chamadas de variáveis de folga.

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \leq b_j \text{ passa a ser } \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j + x_{n+1} = b_j \text{ e}$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \geq b_j \text{ passa a ser } \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j - x_{n+1} = b_j, \text{ com } x_{n+1} \geq 0$$

2. Ocorrência de $b_i < 0$

Nesse caso basta multiplicar a restrição i por -1 , uma vez que os coeficientes a_{ij} podem ter qualquer sinal.

3. Função objetivo de maximização

Substitui-se a função objetivo dada pela sua simétrica, passando a minimizá-la, ou seja, $Q(x) = \sum_{j=1}^n c_j x_j \rightarrow MÁX$ passa a ser $Q'(x) = -\sum_{j=1}^n c_j x_j \rightarrow MIN$

Todo problema de programação linear apresenta um conjunto de soluções viáveis, podendo ser limitado ou ilimitado. Seja M o conjunto de soluções viáveis de um PPL qualquer, podem-se resumir os possíveis casos da seguinte maneira:

- a. $M = \emptyset \rightarrow$ PPL não tem solução viável e não possui solução ótima;
- b. $M \neq \emptyset$ e limitado \rightarrow PPL possui solução ótima que pode ser única ou não;
- c. $M \neq \emptyset$ e não limitado:
 - $Q(x)$ possui ótimo em M . Nesse caso, o PPL possui solução ótima que pode ser única ou não;
 - $Q(x)$ não possui ótimo em M , o que significa que pode crescer ou decrescer ilimitadamente. Nesse caso, o PPL não possui solução ótima.

Outro conceito importante é que o conjunto M das soluções viáveis de um problema de programação linear é sempre convexo. Isso quer dizer que toda combinação linear convexa de qualquer par de pontos pertencentes a M também pertencerá a M . Sendo mais específico, o conjunto de soluções viáveis é um polítopo convexo e, no caso de ser limitado, M é um poliedro convexo. A Figura 4.2 representa graficamente os tipos de conjuntos existentes.

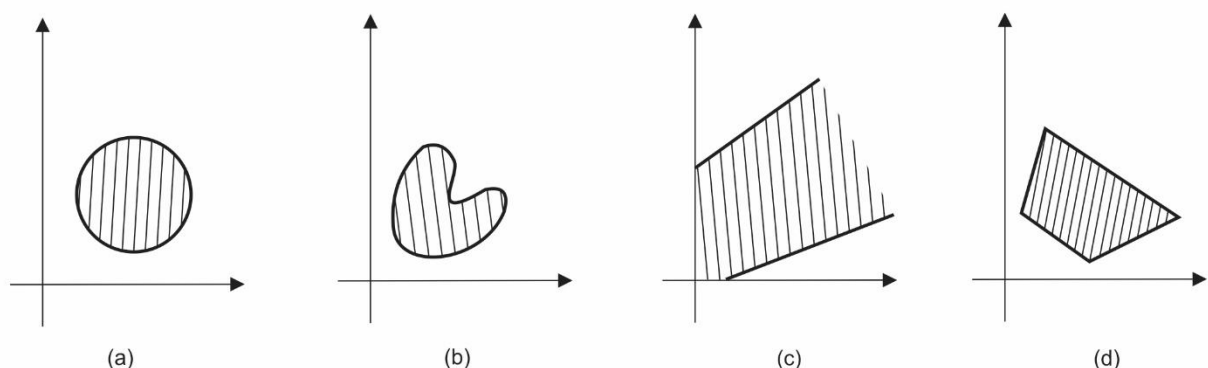


Figura 4.2: (a) conjunto convexo; (b) não convexo; (c) polítopo convexo e (d) poliedro. (FONTE: Adaptado de BREGALDA et al., 1983)

Um ponto x , de um conjunto convexo M , é chamado de vértice de M quando ele não pode ser obtido como combinação linear convexa legítima de nenhum par de pontos distintos de M . Geometricamente, o vértice é obtido pela interseção de um número suficiente de hiperplanos definidos pelas restrições e condições de não negatividade do problema. Na Figura 4.3, pode-se observar os vértices A , B , C , D e E formados pelas interseções dos hiperplanos R_1 , R_2 , R_3 , R_4 , R_5 e R_6 .

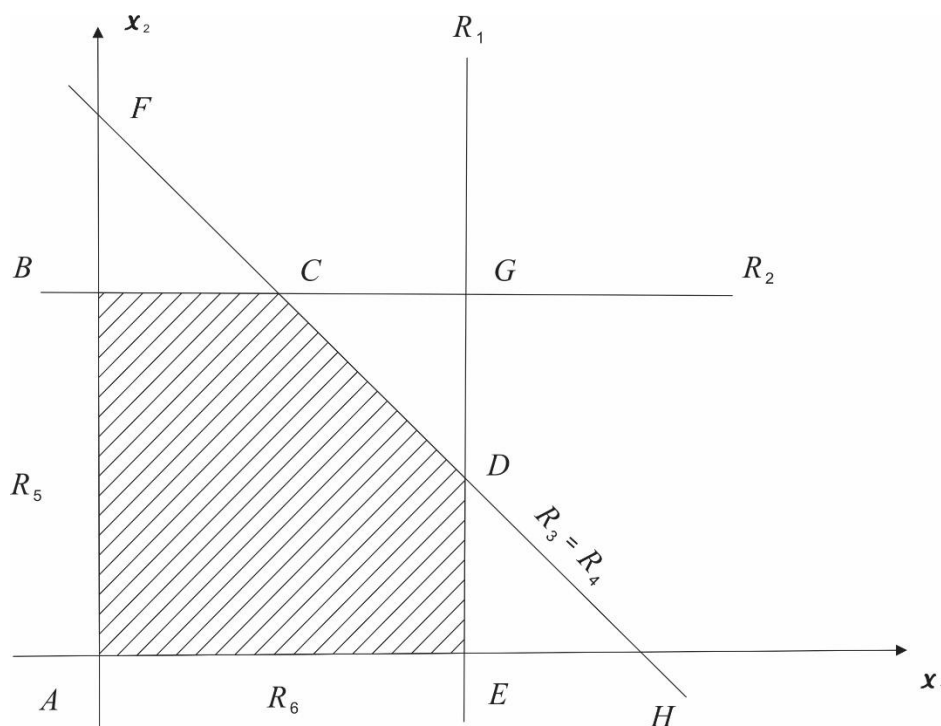


Figura 4.3: Vértices de um poliedro de um problema de programação linear. (FONTE: Adaptado de BREGALDA et al., 1983)

Através das demonstrações da álgebra linear, pode-se verificar que x é vértice do conjunto M de soluções viáveis do PPL se, e somente se, x for solução básica viável. Além disso, existe um número finito de soluções básicas viáveis, logo, o problema tem um número finito de vértices. Caso o problema em questão tenha um mínimo ou um máximo, pelo menos um desses vértices é a solução ótima. As técnicas desenvolvidas buscam justamente encontrar esse vértice para otimizar o problema.

4.2.1 O algoritmo *simplex*

Admitindo que o problema tenha solução ótima, foi mostrado anteriormente que uma solução se encontra entre uma das soluções básicas viáveis. O SIMPLEX é

nada mais que um algoritmo capaz de, a partir de uma solução básica viável inicial, gerar novas soluções básicas viáveis cada vez melhores, até chegar a uma que não pode mais ser melhorada. Seja um PPL formulado da maneira a seguir, o problema pode ser resolvido em basicamente quatro passos:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \leq b_i, \text{ onde } b_i \geq 0 \\ x_j \geq 0 \\ \sum_{j=1}^n c_jx_j = Q(x) \rightarrow MIN \end{cases}$$

Antes de tudo, é necessário reduzi-lo à forma padrão. Para isso, é preciso adicionar as variáveis de folga nas equações de restrição do problema.

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n + x_{n+1} & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n + x_{n+2} & = b_2 \\ \vdots & \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n + x_{n+m} & = b_m \\ c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_nx_n & = Q(X) \end{cases}$$

É comum representar esse sistema de equações através de um quadro, onde as variáveis são dispostas na primeira linha e o restante é preenchido com os seus respectivos coeficientes.

Tabela 4.1: Quadro representativo do problema de programação linear.

x_1	x_2	...	x_{n+1}	x_{n+2}	x_{n+m}	B
a_{11}	a_{12}	...	1	0	0	b_1
a_{21}	a_{22}	...	0	1	0	b_2
...
a_{m1}	a_{m2}	...	0	0	1	b_m
c_1	c_2	...	0	0	0	$Q(x)$

Segundo Nguyen et al. (2000), o passo número 1 do algoritmo é definir a primeira solução básica viável para o problema. A estratégia adotada é atribuir às primeiras n variáveis do sistema (chamadas de variáveis não básicas, VNB) o valor zero, já que as m variáveis a seguir (variáveis básicas, VB) encontram-se na forma escalonada. Dessa forma, o sistema pode ser resolvido diretamente.

O segundo passo é procurar uma solução melhor, isto é, que minimize ainda mais a função objetivo. Para isso, é necessário que uma variável não básica seja transformada em uma variável básica e, conseqüentemente, que uma VB vire VNB. Supondo que seja escolhida uma variável s qualquer para tornar-se a nova variável básica, o valor da nova função objetivo nesse caso será $Q(x) = c_s x_s$, já que o valor anterior era $Q(x) = 0$. Essa análise permite estabelecer uma regra para a escolha da nova VB. Como o objetivo é minimizar $Q(x)$, deve-se escolher x_s tal que c_s seja menor que zero. Caso exista mais de um coeficiente negativo na função objetivo, pode-se escolher x_s tal que:

$$c_s = \min_{c_j < 0} (c_j)$$

Não existindo coeficiente negativo, isto é, $c_j > 0$, então torna-se impossível diminuir o valor da função objetivo. Logo, $Q(x)$ representa o mínimo, ou seja, a primeira solução básica viável é a solução ótima do PPL. Caso exista ao menos uma VNB tal que $c_s = 0$, isso significa que existem uma infinidade de soluções ótimas.

O terceiro passo consiste em atribuir valor à nova variável básica e determinar a quem será a nova variável não básica. Para que seja respeitada a condição de não negatividade, é necessário escolher a linha r que forneça o menor coeficiente a partir da relação b_i/a_{is} . Esse coeficiente a_{rs} recebe o nome de pivô e a coluna x_{n+r} será a nova variável não básica.

O quarto e último passo do algoritmo consiste em reduzir o problema à forma canônica, isto é, aplicar o método de Gauss-Jordan na determinação dos valores das variáveis básicas. Isso se dá através das operações de pivoteamento:

- i. Dividir a linha pivô pelo pivô a_{rs} ;
- ii. Anular todos os demais elementos da coluna pivô, incluindo a linha que representa a função objetivo.

Após o quarto passo, está finalizada a primeira iteração do algoritmo *SIMPLEX*. Caso ainda exista algum coeficiente negativo c_s , significa que ainda existe alguma solução melhor que a encontrada na primeira iteração. Deve-se, então, repetir os quatro passos descritos anteriormente até que não haja como melhorar a solução encontrada, de acordo com a tolerância estabelecida.

Como síntese do algoritmo descrito acima, segue um fluxograma representando a lógica apresentada:

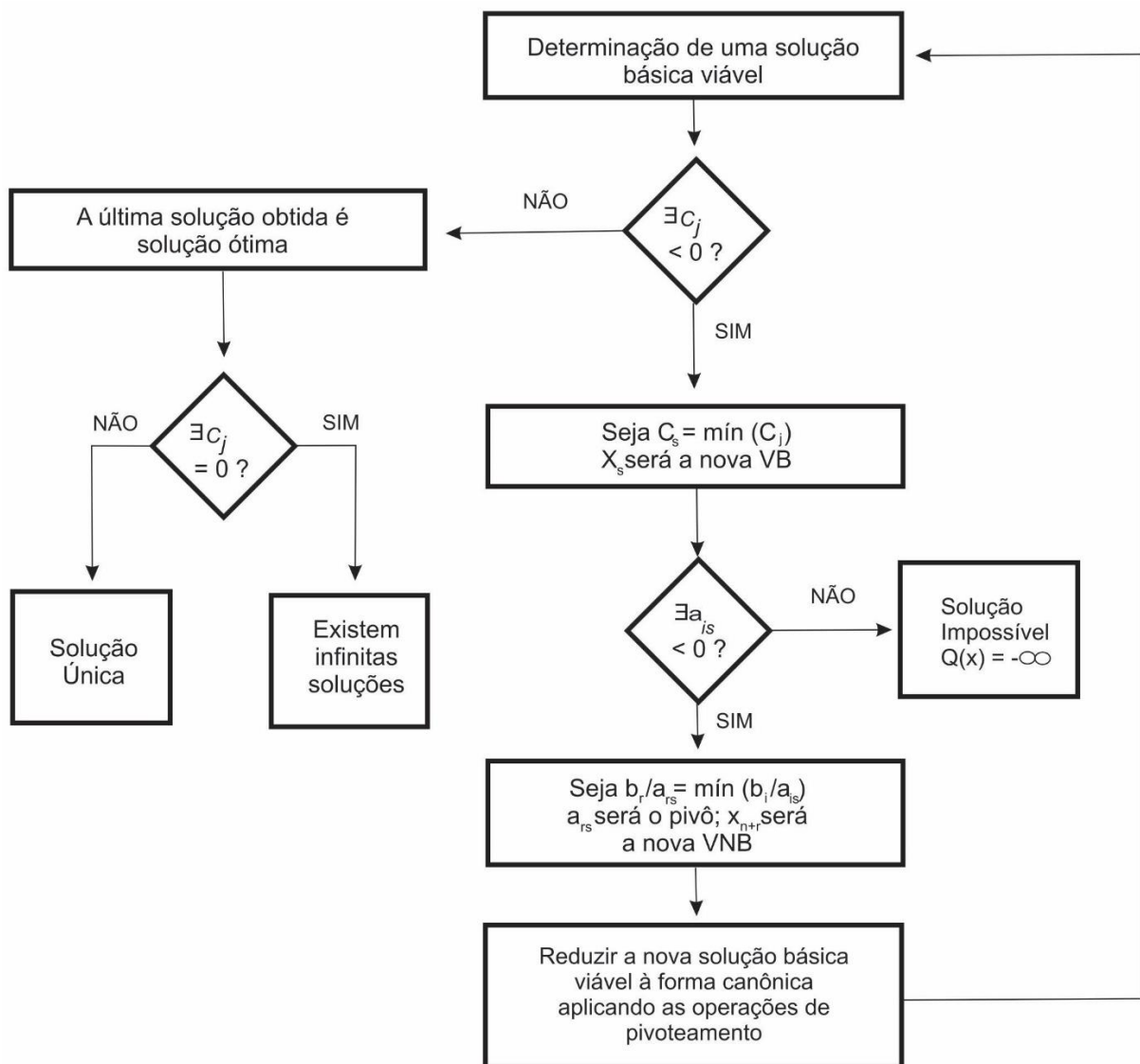


Figura 4.4: Fluxograma da lógica do algoritmo *SIMPLEX*. (FONTE: Adaptado de BOLDRINI et al., 1983)

4.2.2 Novos algoritmos para programação linear

Intuitivamente percebemos que alguns problemas de matemática são mais difíceis de resolver do que outros. Excluindo o fato da resolução do problema estar em um atalho ou em algum detalhe que não tenhamos percebido, podemos dizer que um problema é mais difícil do que outro, face ao número de operações que devem ser realizadas para que a solução seja encontrada. A forma como essas operações são efetuadas, pode, ainda, influenciar na resolução do problema, no que diz respeito ao tempo para se encontrar a solução. Um algoritmo pode ser melhor do que outro e isso ocorre por causa da maneira pela qual as operações que levarão a solução do problema são efetuadas.

Desta forma, a dificuldade do problema de programação linear, em geral, pode ser medida a partir do tempo gasto para que um problema seja resolvido. Podemos dizer que o tempo é escolhido como a medida de complexidade. Vale então ressaltar, que o tempo aqui abordado, está diretamente relacionado ao número de operações (passos) para resolver o problema.

Após o desenvolvimento do algoritmo *SIMPLEX* por Dantzig entre os anos 1947 e 1951 (Potra et al., 2000), diversas outras versões foram feitas a partir do mesmo princípio. A ideia é adaptar a metodologia para ser mais fácil de implementá-la em uma determinada linguagem de programação ou para resolver um problema específico no menor tempo computacional possível.

Kilkas et al. (1980), por exemplo, propõe em seu trabalho um algoritmo. Outra modificação realizada posteriormente deu origem ao *SIMPLEX* revisado, que utiliza multiplicações envolvendo a inversa da matriz base para resolver o problema. O quadro esquemático desse método revisado é bem parecido com o apresentado na Tabela 4.2, porém, as duas últimas linhas são agora chamadas de a_{m+1} e a_{m+2} e são dadas da seguinte forma, de acordo com Kowalik et al. (1983).

Tabela 4.2: Quadro representativo do método *SIMPLEX* revisado.

x_1	x_2	...	x_{n+1}	x_{n+2}	x_{n+m}	x_{n+m+1}	x_{n+m+2}	b
a_{11}	a_{12}	...	1	0	0	0	0	b_1
a_{21}	a_{22}	...	0	1	0	0	0	b_2
...	0	0	...
a_{m1}	a_{m2}	...	0	0	1	0	0	b_m
$a_{m+1,1}$	$a_{m+1,2}$...	0	0	0	1	0	0
$a_{m+2,1}$	$a_{m+2,2}$...	0	0	0	0	1	b_{m+2}

Onde:

$$a_{m+1,j} = c_j$$

$$a_{m+2,j} = - \sum_{i=1}^m a_{ij}$$

$$b_{m+2} = - \sum_{i=1}^m b_i$$

A última equação da Tabela 2.2 é redundante, porém, ela é necessária para determinar a viabilidade do problema na Fase I do algoritmo. A Fase II, por sua vez, calcula de fato o valor da solução ótima do problema. Para facilitar as nomenclaturas, a matriz dos coeficientes $n \times m+2$ será representada por \bar{A} e a matriz identidade formada da coluna $n+1$ até a coluna $n+m+2$ será representado pela letra I .

Fase I

Passo 1: Se $x_{m+n+2} < 0$, então, $\delta_j = \text{linha}_{m+2}(I) \cdot \text{col}_j(\bar{A})$

Passo 2: Se todos δ_j forem maior ou igual a zero então x_{m+n+2} está no seu máximo e não existe solução possível para esse problema. Se pelo menos um δ_j for menor que zero então a variável a ser introduzida no conjunto de solução básica viável é x_k , onde k é a coluna do menor δ_j encontrado.

Passo 3: Calcular $y_i = \text{linha}_i(I) \cdot \text{col}_k(\bar{A})$

Passo 4: Calcular o menor valor da razão $\theta = x_i/y_i$, para y_i maior que zero. Essa variável será retirada do conjunto de solução básica viável. Se todos os y_i forem maiores que zero, não há solução para o problema.

Passo 5: Calcular os novos valores das variáveis na solução básica viável.

$$x_k = \theta$$

$$x_i = x_i - \theta y_i$$

Fase II

Passo 1: Se $x_{m+n+2} = 0$, então, $\gamma_j = \text{linha}_{m+1}(I) \cdot \text{col}_j(\bar{A})$

Passo 2: Encontrar o menor valor negativo dos γ_j calculados, chamado de γ_k . Caso todos os valores de γ_j sejam positivos, a solução é está no seu máximo e o problema está resolvido.

Passo 3: Calcular $y_i = \text{linha}_i(I) \cdot \text{col}_k(\bar{A})$

Passo 4: Calcular o menor valor da razão $\theta = x_i/y_i$, para y_i maior que zero. Essa variável será retirada do conjunto de solução básica viável.

Passo 5: Calcular os novos valores das variáveis na solução básica viável.

$$x_k = \theta$$

$$x_i = x_i - \theta y_i$$

Segundo Nguyen et al. (2000), o método *SIMPLEX* revisado apresenta uma eficiência muito superior em termos de velocidade, precisão e requisição de memória em relação ao método *SIMPLEX* tradicional. O quadro comparativo abaixo mostra a diferença de tempo de processamento para resolução de problemas de diferentes

tamanhos. Ainda assim, há métodos mais eficazes que envolvem técnicas de fatoração da matriz ao invés de inversão, principalmente para o caso de problemas esparsos.

Tabela 4.3: Comparação entre o tempo de execução do método *SIMPLEX* tradicional e o revisado. (FONTE: Adaptado de NGUYEN et al., 2000)

Nº de variáveis e restrições	Tipo de Restrição	SIMPLEX tradicional	SIMPLEX revisado
200	Equação	15,9s	0,9s
200	Inequação	15,7s	2,2s
600	Equação	553,8s	8,2s
600	Inequação	553,4s	42,2s
2000	Equação	6,5h	90,8s
2000	Inequação	6,5h	25min

4.2.2.1 Método de pontos interiores

. Apesar do método *SIMPLEX* quase sempre convergir em um número de iterações proporcional a uma pequena fração da dimensão do problema, é sabido que ele pode percorrer todos os vértices do polígono viável. Consequentemente, no pior caso, o algoritmo pode se tornar um problema exponencial. Para a ciência da computação, um bom algoritmo deve resolver o problema em tempo polinomial, em $O(n^2L)$ iterações requerendo $O(n^4L)$ bits operacionais, onde L é dado por $L = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (\log_2[(a_{ij} + 1) + 1])$ (Potra et al., 2000), sendo essa uma das maiores críticas em relação ao método *SIMPLEX*.

Segundo Wright (2004), o primeiro algoritmo de tempo polinomial da programação linear foi idealizado por Leonid Khachiyan em 1979. O seu algoritmo denominado método elipsoide não se baseia na existência de um vértice e sim na existência de uma barreira externa que garante a ocorrência de um grande elipsoide delimitando a solução e uma barreira interna que especifica o quão pequeno o elipsoide final deve ser para garantir proximidade suficiente à solução exata. No entanto, mesmo com a complexidade favorável do método elipsoide, que possui ordem $O(nL)$, o seu desempenho na prática era inferior em comparação ao método *SIMPLEX*.

O campo de estudo da otimização teve uma grande mudança em 1984, quando Narendra Karmarkar publicou seu trabalho sobre o método de pontos interiores para programação linear que era de tempo polinomial e, diferente do algoritmo de Khachian, apresentava um desempenho igual ou superior ao método *SIMPLEX*, resolvido em $O(\sqrt{n}L)$ iterações e requerendo $O(n^3L)$ bits operacionais. Hoje os novos algoritmos como o proposto por Anstreicher (1999) apresentam uma ordem de complexidade de $O([n^3/\log n]L)$ operações. Esse método apresenta algumas propriedades não usuais: uma forma não padrão para os problemas de programação linear e descrição baseada em geometria não linear, que muito se assemelha aos métodos de barreira (Wright, 2004). Adler (1989) publicou em seu trabalho diversos casos de problemas de programação linear resolvidos através do método dos pontos interiores.

Segundo Gondzio (2012), o método dos pontos interiores apresenta desempenho competitivo ao método *SIMPLEX* em problemas com dimensões menores que um milhão de variáveis e restrições. A partir dessa magnitude, o método proposto por Karmarkar apresenta vantagens significativas em relação ao método *SIMPLEX*. Gondzio (2012) afirma, contudo, ser difícil apontar o melhor método para uma classe específica de problemas. Enquanto o *SIMPLEX* tem vantagens em esparsidades encontradas no problema, a sua natureza sequencial o torna difícil de paralelizar. Por outro lado, o método dos pontos interiores consegue explorar qualquer estrutura em bloco nas matrizes e acelerar as operações algébricas através de massivas paralelizações.

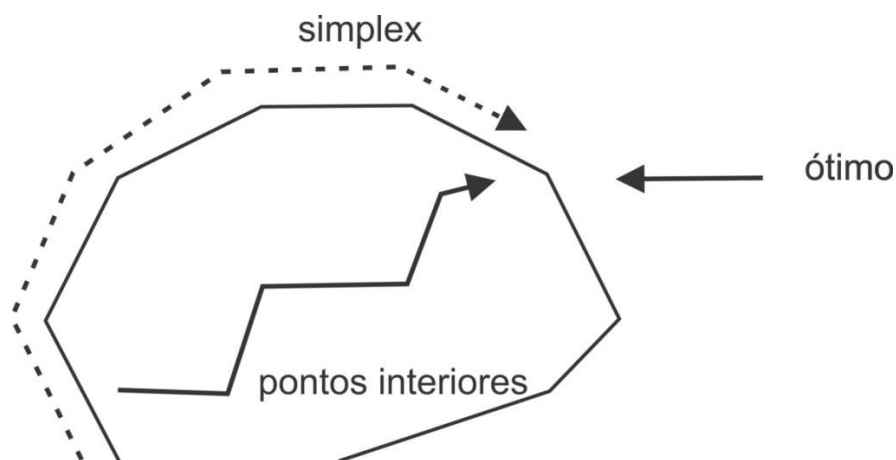


Figura 4.5: Representação da atuação do método *SIMPLEX* e pontos interiores.

4.3 APLICAÇÕES NA ENGENHARIA QUÍMICA

Programação matemática e otimização em geral têm sido usados exaustivamente na engenharia de processos. Isso ocorre porque a maioria dos problemas tem muitas soluções e, na maioria das vezes, não é fácil encontrar uma solução ótima. Além disso, em muitos casos, a economia gerada ao encontrar a melhor solução representa ganhos relativamente altos. Da mesma forma, pode haver perdas significativas caso a solução convirja a ótimos locais. Em suma, a otimização tem se tornado uma ferramenta que vem ajudando as empresas a se manterem competitivas.

Problemas de projeto de equipamentos ou processos tendem a gerar problemas de programação não linear (PNL) ou não linear inteira mista (PNLIM), enquanto problemas de programação e planejamento tem tendência a gerar problemas lineares (PL) ou lineares inteiros mistos (PLIM). Isso ocorre devido às não linearidades que os problemas de projeto têm ao se basearem em predições de modelos de processos. Já os problemas de programação e planejamento de produção, por sua vez, essas predições físicas tendem a ser menos importantes. Por isso, problemas de projeto de trocadores de calor, separadores, reatores e balanços de massa e energia são, em sua maioria, não lineares, conforme pode ser observado na Tabela 4.4. (Biegler et al., 2004).

Tabela 4.4: Aplicação de programação matemática em engenharia de processos.
(FONTE: Adaptado de BIEGLER et al., 2004)

	PL	PLIM	PNL	PNLIM
Projeto				
Trocadores de calor	X	X	X	X
Separadores		X		X
Reatores	X		X	X
Balanços			X	X
Operação				
Planejamento de produção	X	X		X
<i>Supply Chain</i>	X	X		X
Otimização em tempo real	X		X	
Controle				
<i>MPC</i> linear	X			
<i>MPC</i> não linear			X	
Híbrido		X	X	X

Law et al. (2010) ressalta a crescente preocupação em desenvolver as habilidades computacionais dos estudantes de engenharia. Aulas práticas ministradas em laboratórios de informática são ferramentas importantes para consolidar os conceitos teóricos e para fornecer aos futuros engenheiros uma vantagem competitiva significativa em suas carreiras.

García et al. (2012), por exemplo, utiliza um problema que combina a necessidade de atender as demandas de *supply chain* e as restrições ambientais para ensinar aos alunos os conceitos de otimização multi objetivo. A partir de um estudo de caso de uma indústria petroquímica cujo objetivo é se instalar na Europa para produzir acrilonitrila de duas possíveis tecnologias diferentes, o autor faz simplificações para que o problema que é de PLIM seja reduzido a um PL. Em linhas gerais, o problema se baseia em determinar qual tecnologia de manufatura deverá ser utilizada em cada unidade fabril, quais e a qual a quantidade de cada matéria prima deverá ser comprada, a produção por planta, a quantidade em toneladas que deverá ser transferidas de cada unidade para os dois depósitos disponíveis e a quantidade a ser vendida em cada mercado para maximizar os lucros e minimizar os impactos ambientais.

A pesquisa desenvolvida por Illukpitiya et al. (2013) também propõe um modelo de programação linear (LP) para avaliar diversas opções para a produção de açúcar e biocombustíveis a partir de cana de açúcar e outras matérias-primas no Havaí. Mais especificamente, o estudo se concentra em encontrar o açúcar ideal e a matéria-prima de biomassa que maximiza o lucro de produtores na produção de açúcar, etanol e energia elétrica. As matérias-primas incluídas no modelo foram a cana de açúcar, o bagaço, a energia e o sorgo doce. Dados os recursos da terra disponíveis para o cultivo de plantas de produção de energia, na ilha de Maui, quatro cenários de recursos da terra foram considerados. A conclusão do autor, após a resolução do problema de programação linear é que, se forem utilizados os recursos da terra disponíveis na produção de culturas de cana e de energia com a utilização adicional de terras não próprias, a meta de produção de etanol do Havaí para o ano de 2020 pode ser alcançada mantendo dois terços da atual produção de açúcar do Havaí.

Com as informações descritas nesse capítulo, obtêm-se o conhecimento e as técnicas necessárias para resolver o problema de planejamento de produção da refinaria modelada. Chega-se também à conclusão que o método SIMPLEX revisado

atende às necessidades da modelagem proposta por ser tão eficiente quando o método dos pontos interiores para problemas dessa magnitude e de mais fácil implementação computacional. Por esses fatores, ele será utilizado nos próximos capítulos como ferramenta de resolução dos problemas de programação linear.

5. IMPLEMENTAÇÃO E VERIFICAÇÃO DO ALGORITMO

A implementação do algoritmo SIMPLEX revisado proposto Kowalik (1983) foi feita a partir da conversão de um programa em linguagem de programação Pascal para linguagem Fortran 77. A escolha dessa linguagem se justifica pela compatibilidade com a versão de outros *software* licenciados FEQ/UNICAMP para que, no futuro, eles possam ser transformados em um único programa mais facilmente.

Algumas dificuldades foram encontradas por utilizar uma versão antiga de linguagem de programação. A principal delas é devido à impossibilidade de alocação dinâmica de memória, impedindo assim que seja reservada memória estritamente o suficiente para a criação das matrizes e vetores necessários para o código funcionar. A solução encontrada foi alocar um tamanho fixo de 1000 linhas e/ou colunas para todos os vetores e matrizes utilizados no código para que cobrisse todos os problemas estudados. No entanto, essa linguagem apresenta a vantagem de ter uma compilação mais rápida em relação à versão 90.

Acredita-se que esse não seja um problema que impeça a continuidade do trabalho, já que na área de Engenharia Química os problemas estudados não requerem o uso de uma quantidade grande de memória do computador utilizado. Matrizes 1000x1000 cobrem com folga a maioria dos problemas e não sobrecarregam o computador.

O algoritmo implementado necessita de três arquivos de entrada em formato *.txt*, além de mais três informações digitadas pelo usuário sobre o tamanho do problema: número de variáveis, número de restrições e tolerância máxima desejada. A partir dessas informações, o código gera um arquivo de saída também em formato *.txt* que contém compiladas, além das informações de entrada, o valor ótimo da função objetivo e os valores das variáveis da solução encontrada. Caso não haja solução ótima para o problema imputado, essa informação será informada ao usuário no arquivo de saída.

Para a verificação da efetividade do algoritmo, isto é, capacidade de resolver os problemas com erros pequenos e tempos curtos, foi utilizado problemas disponíveis na literatura com resultado conhecido. Diversos problemas de pequena, média e alta complexidade, dentro e fora da área de Engenharia Química, foram testados e comparados. Sete deles são apresentados nesse trabalho,

correspondentes aos trabalhos de Kowalik et al. (1983), Bregalda et al. (1983), Boldrini et al. (1980) e Himmelblau et al. (2001).

5.1 VERIFICAÇÃO DA IMPLEMENTAÇÃO DO ALGORITMO

Na Tabela 5.1 são resumidos os sete problemas que irão ser apresentados para facilitar o acompanhamento do leitor.

Tabela 5.1: Problemas utilizados para verificação do algoritmo implementado.

Problema	Autor	Descrição
1	Kowalik et al. (1983)	Problema numérico
2	Bregalda et al. (1983)	Problema numérico
3	Boldrini et al. (1980)	Fabricantes de mesas e cadeiras
4	Himmelblau et al. (2001)	Refinaria de petróleo
5	Himmelblau et al. (2001)	Colunas de destilação
6	Himmelblau et al. (2001)	Reator de craqueamento térmico
7	Himmelblau et al. (2001)	Sistema de caldeira e turbinas

5.1.1 Problema 1

No trabalho de Kowalik et al. (1983) em que se propõe a metodologia do *SIMPLEX* revisado, o seguinte problema foi apresentado:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 15 \\ 2x_1 + x_2 + 5x_3 = 20 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 + x_4 = 10 \\ x_1, x_2, x_3, x_4 \geq 0 \\ MAX \rightarrow x_1 + 2x_2 + 3x_3 - x_4 \end{array} \right.$$

A solução obtida foi a mesma encontrada pelos autores, onde o valor máximo da função objetivo é 15, sendo x_1 , x_2 , x_3 iguais a 2,5 e x_4 igual a zero. O arquivo de saída obtido pelo programa pode ser verificado no Apêndice B.

5.1.2 Problema 2

O autor Bregalda et al. (1983) também apresenta no seu livro alguns exemplos de problemas de programação linear com solução conhecida. O resultado mostrado abaixo representa a solução encontrada para o seguinte problema:

$$\left\{ \begin{array}{l} 3x_1 + 5x_2 \leq 15 \\ 5x_1 + 2x_2 \leq 10 \\ x_1, x_2 \geq 0 \\ MAX \rightarrow 5x_1 + 3x_2 \end{array} \right.$$

A solução é a mesma obtida pelo autor, que resolveu analiticamente e apresentou o resultado na forma de fração. A função objetivo é igual a $\frac{235}{19}$, x_1 igual a $\frac{20}{19}$ e x_2 igual a $\frac{45}{19}$. O Arquivo de saída obtido pelo algoritmo do programa encontra-se disponível no Apêndice B.

5.1.3 Problema 3

Um problema proposto por Boldrini (1980) se refere a um fabricante de mesas e cadeiras. Segundo ele, o lucro da fábrica é de R\$ 4.500 em cada cadeira e de R\$ 8.000 em cada mesa vendida. Supõe-se que devido à forte demanda desses itens, consegue-se vender toda a produção da fábrica. Mas, a produção da firma é limitada em dois aspectos:

- Cada cadeira produzida utiliza 5 unidades de jacarandá. Da mesma forma, cada mesa de jacarandá produzida utiliza 20 unidades de jacarandá. Dispõe-se de um total de 400 unidades de jacarandá.
- Cada cadeira produzida gasta 10 homens-hora e cada mesa produzida gasta 15 homens-hora. Dispõe-se de um total de 450 homens-hora para realizar o trabalho.

O objetivo do fabricante é descobrir qual a quantidade ótima de cadeiras e mesas a serem fabricadas, de tal modo que o lucro total seja o maior possível. O problema apresentado pode ser apresentado da seguinte forma, considerando x_1 como número de cadeiras e x_2 como número de mesas.

$$\left\{ \begin{array}{l} 5x_1 + 20x_2 \leq 400 \\ 10x_1 + 15x_2 \leq 450 \\ x_1, x_2 \geq 0 \\ \text{MAX} \rightarrow 4500x_1 + 8000x_2 \end{array} \right.$$

O resultado obtido pelo algoritmo implementado nesse trabalho foi mesmo apresentado por Boldrini: 24 cadeiras e 12 mesas com um lucro de R\$ 220.000,00. O arquivo de saída do programa pode ser conferido também no Apêndice B.

5.1.4 Problema 4

Himmelblau et al. (2001) utiliza os conceitos de otimização aplicados na Engenharia Química. Alguns problemas típicos da indústria são citados no seu trabalho e também foram testados no programa utilizado nesse mestrado. Os

problemas agora apresentam uma complexidade maior que os anteriormente citados, contendo até 30 variáveis e 20 restrições a serem atendidas.

Um deles diz respeito a um problema de planejamento e controle de produção de uma refinaria de petróleo. O esquema abaixo simplifica o processo de refino:

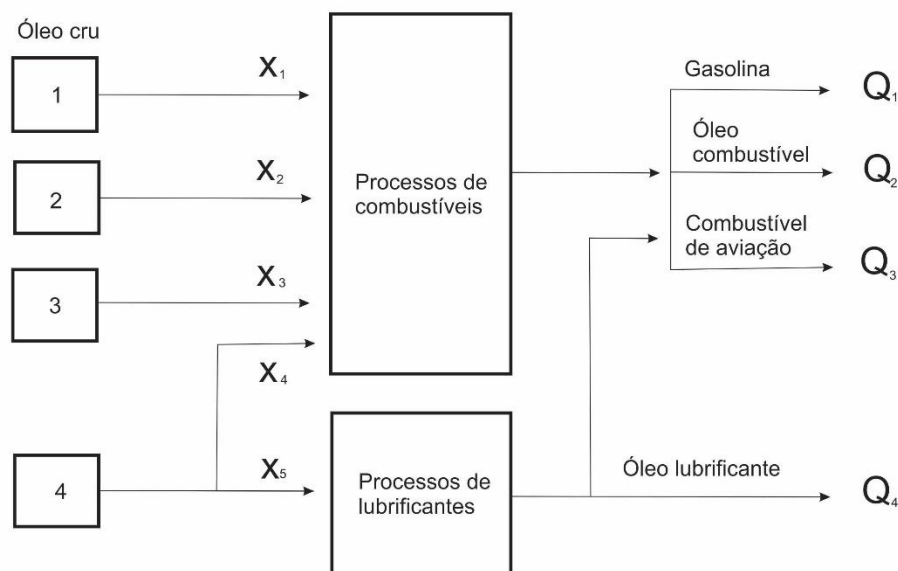


Figura 5.1: Esquema simplificado de uma refinaria de petróleo. (FONTE: Adaptado de HIMMELBLAU et al., 2001)

Segundo o autor, para cada tipo de produto há uma demanda de mercado e uma restrição de produção. A Tabela 5.2 concentra essas informações, juntamente com a composição mássica de cada óleo cru, preço de venda, custos operacionais, entre outras informações:

Tabela 5.2: Informações sobre o problema da refinaria proposto por Himmelblau et al. (2001).

Produtos	Composição dos óleos crus					Preço de venda (\$/bbl)	Demanda mercado (10 ³ bbl/sem)
	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄	X ₅		
Gasolina	0,6	0,5	0,3	0,4	0,4	45	170
Óleo combustível	0,2	0,2	0,3	0,3	0,1	30	85
Comb. de aviação	0,1	0,2	0,3	0,2	0,2	15	85
Óleo lubrificante	0	0	0	0	0,2	60	20
Perdas operacionais	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	-	-
Custo do óleo cru (\$/bbl)	15	15	15	25	25		
Custo operacional (\$/bbl)	5	8,5	7,5	3	2,5		
Oferta de óleo cru disponível (10 ³ bbl/sem)	100	100	100	200			

O objetivo é alocar nos dois processos os óleos disponíveis, sujeito às restrições de oferta e demanda, para que o lucro semanal seja maximizado. Para que fosse possível resolver esse problema, foi necessário colocá-lo na forma padrão:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 \leq 100 \\ x_2 \leq 100 \\ x_3 \leq 100 \\ x_4 + x_5 \leq 200 \\ 0,6x_1 + 0,5x_2 + 0,3x_3 + 0,4x_4 + 0,4x_5 \leq 170 \\ 0,2x_1 + 0,2x_2 + 0,3x_3 + 0,3x_4 + 0,1x_5 \leq 85 \\ 0,1x_1 + 0,2x_2 + 0,3x_3 + 0,2x_4 + 0,2x_5 \leq 85 \\ 0,2x_5 \leq 20 \\ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \geq 0 \\ \text{MAX} \rightarrow -14,5x_1 - 8x_2 - 4,5x_3 - 2x_4 - 8,5x_5 \end{array} \right.$$

A função objetivo acima representa a simplificação da equação que representa o lucro, isto é, receita dos produtos subtraído do custo de produção: $\sum_1^4 \vartheta_p \times Q_p - \sum_1^5 C_c \times X_c$, onde ϑ_p é o preço de venda e C_c representa o custo do óleo somado ao custo operacional. A solução obtida foi a mesma do autor, que encontrou um lucro máximo de 3.400 k\$/semana, sendo a divisão entre as correntes da seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = 100 \\ x_2 = 100 \\ x_3 = 66,667 \\ x_4 = 0 \\ x_5 = 100 \end{array} \right.$$

Substituindo os valores nas equações dos produtos, chega-se à conclusão que o ideal é produzir 170, 70, 70 e 20 kbbbl/semana de, respectivamente, gasolina, óleo combustível, combustível de aviação e óleo lubrificante.

5.1.5 Problema 5

Um problema que também pode ser otimizado através de programação linear é a operação de colunas de destilação. No esquema proposto por Himmelblau et al. (2001), duas colunas são utilizadas em série para separar solventes orgânicos, como pode ser observado no esquema da Figura 5.2. A alimentação é composta por nafta que custa 42 \$/bbl enquanto o componente leve é vendido por 53\$/bbl e o

componente de fundo passa por uma segunda coluna. O solvente médio contendo de 50 a 70% do componente de fundo é vendido por 68 \$/bbl e o solvente pesado por 42 \$/bbl contendo de 30 a 50% do componente de fundo. No entanto, outra unidade da fábrica consome 200 bbl/dia do solvente médio e o mercado externo tem uma demanda máxima de outros 200 bbl/dia. A capacidade de processamento dessas colunas é uma alimentação de 2000 bbl/dia de nafta e o custo operacional associado a cada coluna é de 1,25 \$/bbl.

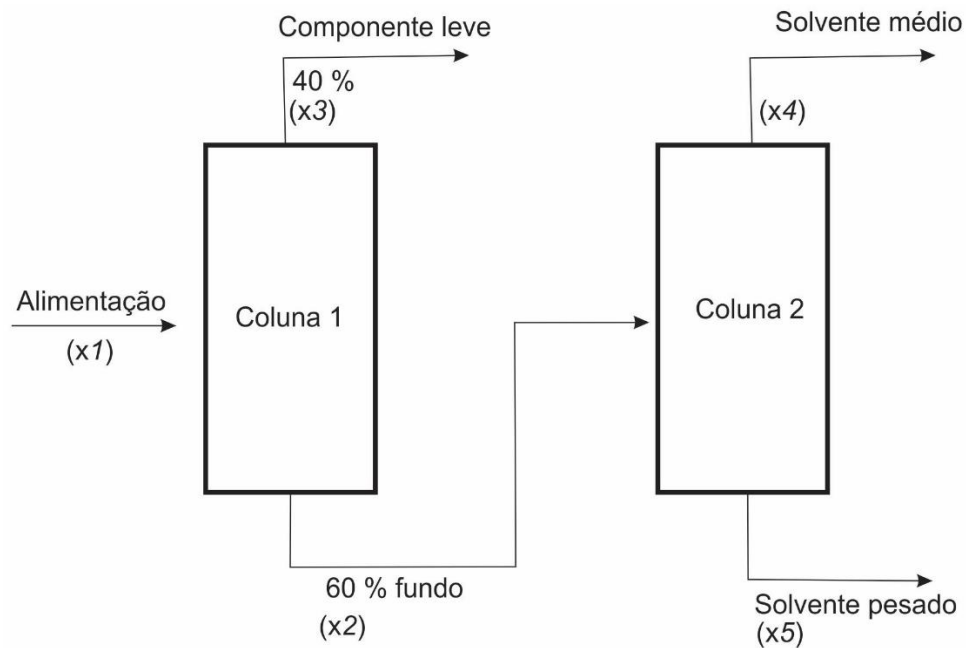


Figura 5.2: Esquema representativo das colunas de destilação. (FONTE: Adaptado de HIMMELBLAU et al., 2001)

Pelo balanço de massa, chega-se as seguintes restrições de processo:

$$x_1 = x_3 + x_4 + x_5$$

$$0,6x_1 = x_4 + x_5 \rightarrow x_1 = 1,667(x_4 + x_5)$$

$$x_3 = 0,4x_1 \rightarrow 0,667(x_4 + x_5)$$

$$x_2 = x_4 + x_5$$

$$\frac{x_4}{x_2} \geq 0,5$$

$$\frac{x_5}{x_2} \geq 0,3$$

$$\frac{x_4}{x_2} \leq 0,7$$

$$\frac{x_5}{x_2} \leq 0,5$$

$$x_4 \geq 200$$

$$x_4 \leq 400$$

$$x_1 \leq 2000 \rightarrow x_4 + x_5 \leq 1200$$

$$x_4 \geq 0$$

$$x_5 \geq 0$$

Em alguns casos, é necessário linearizar algumas restrições antes de aplicar as técnicas de resolução de problemas de programação linear. Nesse exemplo, as inequações envolvendo divisões podem ser reescritas da seguinte forma:

$$x_4 - x_5 \geq 0$$

$$0,7x_5 - 0,3x_4 \geq 0$$

A função objetivo é definida da seguinte maneira para a maximização dos lucros:

$$f = 68x_4 + 42x_5 + 53x_3 - 42x_1 - 1,25x_1 - 1,25x_2$$

Substituindo os valores de x_1 , x_2 e x_3 , ela pode ser reescrita da seguinte forma:

$$f = -30x_4 - 4x_5$$

Ao aplicar o algoritmo implementado, o resultado obtido foi o mesmo: lucro máximo de 13.600 \$/dia com x_4 igual a 400 bbl/dia e x_5 igual a 1333 bbl/dia.

5.1.6 Problema 6

Reatores que dão origem a uma variedade de produtos também são bons candidatos à aplicação de programação linear. Nessas situações, cada reagente produz certa distribuição de produtos e, quando diversos reagentes são utilizados, é desejável otimizar a quantidade de reagentes para atender as restrições de demanda.

Himmelblau et al. (2001) descreve um problema de otimização de um reator de craqueamento térmico que possui uma alimentação composta por etano, propano, gásóleo e DNG. Os produtos metano, etano, etileno, propano, propileno, butadieno, gasolina e óleo combustível são formados de acordo com a combinação das frações mássicas dependente de cada tipo de combustível. A tabela 5.3 descreve distribuição do produto obtido após o craqueamento, utilizando diferentes alimentações e a Figura 5.3 mostra um esquema simplificado do reator de craqueamento térmico.

Tabela 5.3: Frações mássicas dos produtos obtidos com o craqueamento térmico.

Produto	Alimentação			
	Etano	Propano	Gasóleo	DNG
Metano	0,07	0,25	0,10	0,15
Etano	0,40	0,06	0,04	0,05
Etileno	0,50	0,35	0,20	0,25
Propano	-	0,10	0,01	0,01
Propileno	0,01	0,15	0,15	0,18
Butadieno	0,01	0,02	0,04	0,05
Gasolina	0,01	0,07	0,25	0,30
Óleo combustível	-	-	0,21	0,01

A capacidade de processamento dos gases de alimentação é de 200.000 lb/h. Existe também uma restrição de capacidade de processamento de etileno de 50.000 lb/h e de 20.000 lb/h de propileno. Além disso, cada corrente de alimentação tem uma demanda térmica para operação do reator: Etano de 8364 Btu/lb, Propano 5016 Btu/lb, Gasóleo 3900 Btu/lb e DNG 4553 Btu/lb. O objetivo desse problema é maximizar os lucros a partir da escolha ideal de correntes de alimentação, respeitando as restrições e demandas do processo.

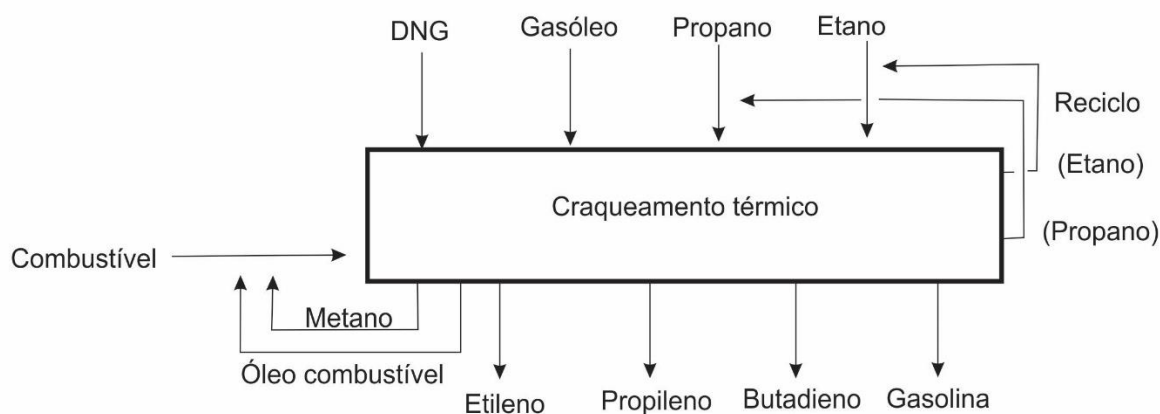


Figura 5.3: Esquema representativo do reator de craqueamento térmico.

Todo metano e óleo combustível produzido no reator são reciclados para se juntar a corrente de gás natural como combustível do processo. Os poderes caloríficos desses gases são, respectivamente, 21.520 Btu/lb, 18.000 Btu/lb e 21.520 Btu/lb, sendo que é necessária uma demanda térmica de 20×10^6 Btu/h.

Os custos e preços envolvidos são, em centavos por libra:

Etano = 6,55

Propano = 9,73

Gasóleo = 12,50

DNG = 10,14

Metano = 5,38

Etileno = 17,75

Propileno = 13,79

Butadieno = 26,64

Gasolina = 9,93

Óleo combustível = 4,50

Considerando as seguintes nomenclaturas das correntes envolvidas, é possível montar a função objetivo do problema:

x_1 = alimentação virgem de etano

x_2 = alimentação virgem de propano

x_3 = alimentação de gasóleo

x_4 = alimentação de DNG

x_5 = reciclo de etano

x_6 = reciclo de propano

x_7 = alimentação de combustível

$$f = \text{preço de venda} - \text{custo de alimentação} - \text{custo de energia}$$

O preço de venda por ser obtido a partir dos valores passados anteriormente e as composições de cada corrente de alimentação discriminadas na Tabela 5.2.

$$\text{Etileno} = 17,75 (0,5x_1 + 0,5x_5 + 0,35x_2 + 0,35x_6 + 0,20x_3 + 0,25x_4)$$

$$\text{Propileno} = 13,79 (0,01x_1 + 0,01x_5 + 0,15x_2 + 0,15x_6 + 0,15x_3 + 0,18x_4)$$

$$\text{Butadieno} = 26,64 (0,01x_1 + 0,01x_5 + 0,02x_2 + 0,02x_6 + 0,04x_3 + 0,05x_4)$$

$$\text{Gasolina} = 9,93 (0,01x_1 + 0,01x_5 + 0,07x_2 + 0,07x_6 + 0,25x_3 + 0,30x_4)$$

$$\text{Total} = 9,39x_1 + 9,51x_2 + 9,17x_3 + 11,23x_4 + 9,39x_5 + 9,51x_6$$

O custo de alimentação é dado por:

$$\text{Alimentação} = 6,55x_1 + 9,73x_2 + 12,50x_3 + 10,14x_4$$

Combinando as duas equações, temos a função objetivo final:

$$f = 2,84x_1 - 0,22x_2 - 3,33x_3 + 1,09x_4 + 9,39x_5 + 9,51x_6$$

As restrições do problema devem ser consideradas:

- Capacidade do reator:

$$1,1(x_1 + x_5) + 0,9(x_2 + x_6) + 0,9x_3 + x_4 \leq 200.000$$

- Limitação de processamento do etileno:

$$0,5x_1 + 0,35x_2 + 0,25x_3 + 0,25x_4 + 0,5x_5 + 0,35x_6 \leq 100.000$$

- Limitação de processamento do propileno:

$$0,01x_1 + 0,15x_2 + 0,15x_3 + 0,18x_4 + 0,01x_5 + 0,15x_6 \leq 20.000$$

- Reciclo de etano:

$$0,4x_1 + 0,06x_2 + 0,04x_3 + 0,05x_4 - 0,6x_5 + 0,06x_6 = 0$$

- Reciclo de propano:

$$0,1x_2 + 0,01x_3 + 0,01x_4 - 0,9x_6 = 0$$

- Restrição de calor:

$$oferta = 21.520x_7 + 21.520(0,07x_1 + 0,25x_2 + 0,10x_3 + 0,15x_4 - 0,07x_5 + 0,25x_6)$$

$$oferta = 1506,4x_1 + 5380x_2 + 5932x_3 + 3408x_4 + 1506,4x_5 + 5380x_6 + 21.520x_7$$

$$demanda = 8364(x_1 + x_5) + 5016(x_2 + x_6) + 3900x_3 + 4553x_4$$

$$demanda = 8364x_1 + 5016x_2 + 3900x_3 + 4553x_4 + 8364x_5 + 5016x_6$$

Considerando a perda de calor de 20.000.000 Btu/h:

$$-6857,6x_1 + 364x_2 + 2032x_3 - 1145x_4 - 6857,6x_5 + 364x_6 + 21.520x_7 = 20.000.000$$

A Tabela 5.4 apresenta a solução ótima encontrada para o problema descrito utilizando o programa desse trabalho. Essa solução é mesma encontrada utilizando-se o módulo do gradiente não linear presente no software Excel®.

Tabela 5.4: Comparação dos resultados obtidos com solução comercial.

Corrente	Vazão mássica (lb/h)
x ₁ (etano)	109.090,91
x ₂ (propano)	0
x ₃ (gasóleo)	0
x ₄ (DNG)	0
x ₅ (reciclo de etano)	72.727,27
x ₆ (reciclo de propano)	0
x ₇ (combustível)	58.867,86
Etileno	90.909,09
Propileno	1.818,18
Butadieno	1.818,18
Gasolina	1.818,18
Metano	12.727,27
Óleo combustível	0
Função Objetivo	992.727,28

5.1.7 Problema 7

O último caso estudado no processo de verificação do algoritmo implementado é outro problema típico da Engenharia Química proposto por Himmelblau et al. (2001). Na Figura 5.4, pode-se observar um sistema composto por uma caldeira e duas turbinas geradoras de energia elétrica. A primeira turbina é de dois estágios de extração e libera vapor de média e baixa pressão, além de

condensado na saída. Já a segunda turbina apresenta um único estágio de extração com vapor de média pressão e de baixa pressão na saída. Vapor em excesso pode *by-passar* as duas turbinas através das válvulas redutoras de pressão 1 e 2, produzindo vapor de média e baixa pressão.

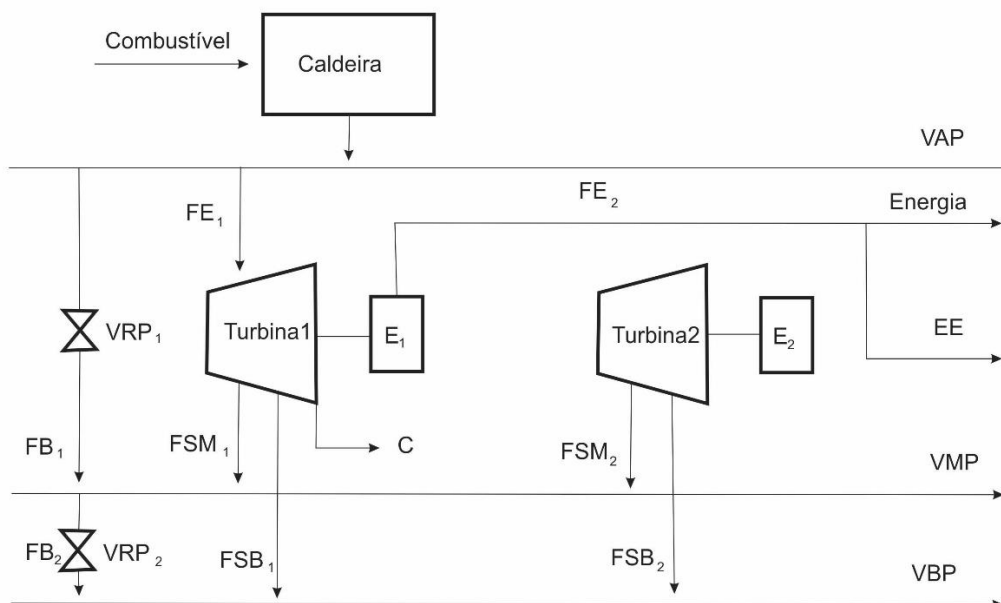


Figura 5.4: Esquema representativo do sistema de geração de energia elétrica.

(FONTE: Adaptado de HIMMELBLAU, 2001)

Onde:

FE_i = Fluxo de entrada para a turbina i (lb_m/h)

FSM_i = Fluxo de saída da turbina i com vapor de média pressão (lb_m/h)

FSB_i = Fluxo de saída da turbina i com vapor de baixa pressão (lb_m/h)

C = fluxo de condensado (lb_m/h)

E_i = Energia gerada pela turbina i (kW)

FB_1 = Fluxo de *by-pass* de alta para média pressão (lb_m/h)

FB_2 = Fluxo de *by-pass* de média para baixa pressão (lb_m/h)

VAP = Fluxo de vapor de alta pressão (lb_m/h)

VMP = Fluxo de vapor de média pressão (lb_m/h)

VBP = Fluxo de vapor de baixa pressão (lb_m/h)

EE = Energia em excesso (kW)

EC = Energia comprada (kW)

VRP = Válvula redutora de pressão

Para atender a demanda, energia elétrica extra deverá ser comprada de outro produtor com uma quantidade mínima de 12.000 kW. Se a energia extra necessária para atender a demanda for menor que a quantidade mínima, a energia em excesso será penalizada com um custo. O objetivo desse problema é determinar o fluxo de cada corrente e a quantidade de energia gerada ou comprada para minimizar o custo de operação do sistema, que representa a soma do custo de produção do vapor de alta pressão, juntamente com a soma dos custos da energia comprada e do excesso de energia. As tabelas abaixo apresentam dados importantes para a resolução desse problema.

Tabela 5.5: Dados de operação das turbinas.

	Turbina 1	Turbina 2
Capacidade máxima de geração (kW)	6.250	9.000
Carga mínima (kW)	2.500	3.000
Fluxo máximo de entrada (lb_m/h)	192.000	244.000
Fluxo máximo de condensado (lb_m/h)	62.000	-
Fluxo máximo interno (lb_m/h)	132.000	-
Fluxo máximo de descarga de baixa pressão (lb_m/h)	-	142.000
Extração de alta pressão (psig)	195	195
Extração de baixa pressão (psig)	62	62

Tabela 5.6: Dados de demandas do sistema.

	Demanda
Fluxo de vapor de média pressão (lb_m/h)	271.536
Fluxo de vapor de baixa pressão (lb_m/h)	100.623
Energia elétrica (kW)	24.550

Tabela 5.7: Dados termodinâmicos do vapor.

	Pressão (psig)	Temperatura (°F)	Entalpia (Btu/lb_m)
Vapor de alta pressão	635	720	1359,8
Vapor de média pressão	195	130 superaquecido	1267,8
Vapor de baixa pressão	62	130 superaquecido	1251,4
Condensado	-	-	193

Tabela 5.8: Dados de custo envolvido na geração.

	Custo
Vapor de alta pressão (\$/lb_m)	0,002614
Energia comprada (\$/kWh)	0,0239
Penalidade por excesso (\$/kWh)	0,009825

As restrições do processo podem ser definidas da seguinte forma:

- Turbina 1:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_1 \leq 6250 \\ E_1 \geq 2500 \\ FSM_1 \leq 192.000 \\ C \leq 62.000 \\ FE_1 - FSM_1 \leq 132.000 \end{array} \right.$$

- Turbina 2:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_2 \leq 9000 \\ E_2 \geq 3000 \\ FE_2 \leq 244.000 \\ FSB_2 \leq 142.000 \end{array} \right.$$

- Balanço de massa:

$$\left\{ \begin{array}{l} VAP - FE_1 - FE_2 - FB_1 = 0 \\ FE_1 + FE_2 + BF_1 - C - VMP - VBP = 0 \\ FE_1 - FSM_1 - FSB_1 - C = 0 \\ FE_2 - FSM_2 - FSB_2 = 0 \\ FSM_1 + FSM_2 + FB_1 - FB_2 - VMP = 0 \\ FSB_1 + FSB_2 + FB_2 - VBP = 0 \end{array} \right.$$

- Balanço de energia:

$$\left\{ \begin{array}{l} 1359,9FE_1 - 1267,8FSM_1 - 1251,4FSB_1 - 192C - 3413P_1 = 0 \\ 1359,8FE_2 - 1267,8FSM_2 - 1251,4FSB_2 - 3413E_2 = 0 \end{array} \right.$$

- Demandas:

$$\left\{ \begin{array}{l} VMP \geq 271.536 \\ VBP \geq 100.623 \\ E_1 + E_2 + EC \geq 24.550 \end{array} \right.$$

- Energia comprada

$$\{EE + EC \geq 12.000\}$$

Resolvendo esse problema, obtêm-se um custo mínimo de operação de 1271,87 \$/h, o mesmo valor obtido por Himmelblau et al.. Os valores encontrados por correntes podem ser observados na Tabela 5.9.

Tabela 5.9: Resultado obtido por corrente no problema da geração de vapor.

Corrente	Nome	Valor
1	E ₁	6.250,0
2	FSM ₁	128.159,1
3	C	8.169,7
4	FE ₁	136.328,8
5	E ₂	7.060,7
6	FE ₂	243.999,9
7	FSB ₂	100.623,0
8	VAP	380.328,8
9	FB ₁	0,0
10	VMP	271.536,0
11	VBP	100.623,0
12	FSB ₁	0,0
13	FSM ₂	143.376,9
14	FB ₂	0,0
15	EC	11.239,3
16	EE	760,7

Foram realizadas, durante essa etapa, a resolução de sete problemas conhecidos da literatura para verificação do algoritmo implementado nesse trabalho. Pode-se observar que o erro encontrado foi muito pequeno, mesmo para os problemas de média complexidade. Isso demonstra a eficácia do código para resolver os problemas da Engenharia Química. A Tabela 5.10 resume os resultados obtidos.

Tabela 5.10: Resultado obtido por corrente no problema da geração de vapor.

Problema	Solução Conhecida	Código Implementado	Erro
1	15,00	15,00	0%
2	12,37	12,37	0%
3	220.000,00	220.000,00	0%
4	3.400,00	3.400,00	0%
5	13.600,00	13.600,00	0%
6	992.727,28	992.727,28	0%
7	1271,87	1270,27	0,13%

6. SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DA MODELAGEM PROPOSTA

6.1 SOLUÇÃO SIMPLIFICADA

O estudo de caso realizado se tornou bastante complexo para ser resolvido da maneira como o algoritmo foi implementado, visto que o número de restrições e variáveis chegou a quase 600. A criação dos arquivos de entrada necessita de um esforço muito grande à medida que a complexidade do problema aumenta e a ocorrência de algum erro é praticamente inevitável, já que essa é uma operação manual. Nesse caso, a matriz é esparsa, isto é, com muitas posições com valor zero e os coeficientes devem ser colocados na posição mxn correta da matriz ou o resultado correto não será obtido.

Após diversas tentativas, chegou-se a conclusão que era necessário simplificar o problema para que ele pudesse ser resolvido utilizando o algoritmo da forma como foi desenvolvido. Continuou-se trabalhando com onze tipos diferentes de óleos e nove cortes, porém, as operações unitárias da refinaria foram tratadas como um único bloco “caixa preta”, muito parecido com o problema 4 proposto por Himmelblau (2001). Os produtos finais, então, foram formados a partir apenas das correntes básicas dos óleos comerciais comprados, como pode ser observado na Tabela 6.1. As restrições de oferta dos óleos, preço de compra, demanda de mercado dos produtos finais, preço de venda foram mantidos conforme modelagem proposta anteriormente.

Tabela 6.1: Composição dos produtos finais a partir dos cortes básicos.

Derivado	Composição
GLP	GLP
GASO	NL
NPTQ	NL + NP
QAV	K
S-10	K + DL
S-500	K + DL
TFM	K + DL + DP + GLV
CAP	RV + GPV
OCB1	K + DL + DP + GLV + GPV + RV
GPV	GPV

Após essa simplificação foi obtido um problema com 67 variáveis e restrições, que permitiu a sua resolução utilizando o algoritmo, pois a criação dos arquivos de

entrada se tornou viável de realizar manualmente. De acordo com as restrições estabelecidas, o lucro máximo obtido foi de 1.447.507,1 U\$/dia.

Chegou-se a conclusão a partir dos resultados obtidos após essa simulação que o óleo mais vantajoso para se comprar é o nigeriano Pennington e, em seguida, o Brent do mar do norte, sendo que o lucro máximo é obtido utilizando apenas 22,3% da capacidade da refinaria. Isso indica que a refinaria tem uma capacidade ociosa grande, caso se queira trabalhar no ponto ótimo, ou que há um erro de projeto em construir uma refinaria com capacidade de 100.000 bbl/dia considerando essas restrições para o problema. A quantidade de produtos produzidos pode ser observada na tabela 6.2.

Tabela 6.2: Composição final das correntes de produto.

Produto final	Produção (bbl/dia)
GLP	87,84
GASO	729,73
NAFTPQ	1.398,65
QAV	1.479,73
S10	3.344,60
S500	3.939,19
TFM	4.243,24
CAP	1.000,00
OCB1	5.243,24
GPV	810,80

6.2 SOLUÇÃO COMPLETA

A fim de concluir o estudo de caso da forma proposta inicialmente, isto é, considerando a refinaria composta por unidades intermediárias como reforma catalítica, hidrotratamento, tanques de mistura e critérios de qualidade como, por exemplo, viscosidade e teor de enxofre, foi feita a otimização utilizando o algoritmo do Gradiente Reduzido Generalizado ou também chamado de GRG não linear presente no *Solver* do Excel®. Dessa forma, foi possível realizar as análises de diferentes cenários e possíveis tomadas de decisão, como ocorre no dia a dia de uma planta petroquímica.

Conforme mostrado na modelagem, o cálculo médio do Índice de Viscosidade transforma o problema da refinaria em não linear, uma vez que há a divisão de duas variáveis na mesma equação. Essas restrições não lineares são outros fatores que

dificultam a resolução do problema pelo algoritmo Simplex Revisado implementado nesse trabalho, que resolve apenas equações lineares.

Toda modelagem e equacionamento foram feitos em uma planilha Excel® de forma que esta funcionasse como uma ferramenta de simulação. Uma vez estruturada a função objetivo e todas as possíveis restrições partiu-se então para a criação de diferentes cenários de forma a avaliar os impactos na rentabilidade da refinaria.

Para melhor visualização dos resultados da simulação, foram selecionados seis indicadores considerados principais para a análise e discussão.

- 1) Petróleo comprado: tipo de petróleo, quantidade em bbl/d e custo;
- 2) Restrição de oferta de petróleo: origem, volume comprado por região ou país em bbl/d, restrição em bbl/d e % uso do fornecedor;
- 3) Unidade de destilação: volume destilado em bbl/d e % uso;
- 4) Unidades de hidrotratamento: volume tratado em bbl/d, restrição de capacidade, % uso e custo;
- 5) Produção final: produto, volume produzido em bbl/d, restrição de mercado, % uso e ganho em dólares com a venda de cada produto;
- 6) Indicadores financeiros: lucro total, lucro por barril e custo operacional em \$/bbl.

Cenário 1: Modelagem inicial

Utilizando as restrições definidas anteriormente na modelagem do problema, chegou-se às seguintes conclusões:

- a. O petróleo argentino atingiu sua capacidade máxima de entrega, o que significa que ele é o melhor economicamente. Sendo assim, negociar maiores volumes diários de entrega dessa região é um potencial para aumentar o lucro da refinaria;
- b. A unidade de destilação opera no lucro máximo longe de sua capacidade máxima de operação, utilizando apenas 60% de sua capacidade. Por ser o ponto ótimo de lucratividade, espera-se que caso seja forçado o modelo a comprar um volume maior de petróleo o lucro diminua, por isso, é necessário eliminar os gargalos da operação para se que seja viável a compra de mais petróleo;
- c. A Unidade de Hidrotratamento de Diesel Leve (UHDTL) foi a única dentre as unidades que atingiu seu limite. Isso indica que essa unidade é um dos gargalos

do processo. Espera-se que com um aumento da sua capacidade, seja viável comprar uma quantidade maior de petróleo, aumentando assim a capacidade de uso da unidade de destilação;

- d. A Unidade de Hidrotratamento de Gasóleo Leve não foi usada, indicando que com a % de enxofre que ela retira atualmente não é economicamente viável ou que não é necessária a passagem de gasóleo leve para hidrotratamento para formação de nenhum produto;
- e. Todos os produtos estão dentro das especificações de qualidade e quantidade, conforme esperado. Observa-se que a produção de querosene de aviação atingiu o máximo de demanda. Isso indica que uma possível estratégia comercial para o aumento da lucratividade da refinaria é desenvolver um mercado local para maior venda de QAV.
- f. O lucro total no ponto ótimo de operação é 180.539,44 U\$/dia, o lucro por barril é 3,03 U\$/bbl e o custo operacional por barril é 2,61 U\$/bbl. Segundo pesquisa de campo realizada com da refinaria de Paulínia da Petrobras, uma boa refinaria deve ter um lucro de pelo menos 5 U\$/bbl e um custo operacional de no máximo 4 U\$/bbl.

Como pode ser visto na Tabela 6.3, quando se aumenta a compra mínima necessária de petróleo para valores acima do ponto ótimo de operação o lucro é menor que R\$180.539,44, conforme esperado.

Tabela 6.3: Variação do lucro em função da compra mínima de petróleo.

Compra mínima (bbl/dia)	Lucro (U\$/dia)
61.000	165.778,91
62.000	155.089,85
63.000	175.470,08
64.000	Não converge
65.000	Não converge
66.000	Não converge
67.000	Não converge
68.000	Não converge
69.000	Não converge
70.000	Não converge

Entre 60.000 bbl/dia e 64.000 bbl/dia, observa-se que existe um mínimo local. Após 64.000 bbl/dia de compra mínima verifica-se que o otimizador não converge

mais com as restrições impostas. Isso ocorre devido a não possibilidade de cumprir os requisitos de qualidade, especificamente a porcentagem de enxofre nos produtos finais, uma vez que a unidade de hidrotratamento de diesel leve (UHDTL) atingiu o limite de sua capacidade. Como essa é uma restrição imposta pelo CONAMA, chega-se a mais um gargalo do processo.

Cenário 2: Construção de uma UHDTL adicional

A partir da observação do Cenário 1 em que a unidade de hidrotratamento de diesel leve apresentou produção na sua capacidade máxima de 8.000 bbl/dia, foi proposta a construção de uma nova unidade UHDTL de mesmo tamanho. Com a capacidade máxima agora de 16.000 bbl/dia, o lucro da refinaria aumentou para 214.851,65 U\$/bbl. Outras mudanças significativas que aconteceram em relação ao modelo inicial foram:

- a. O fornecedor árabe está perto de atingir seu limite de capacidade de entrega diária (94%) e houve um grande acréscimo na compra de petróleo da fonte nigeriana.
- b. O uso da unidade de destilação aumentou para 77%, ainda aquém da sua capacidade máxima. No entanto, comprovou-se que um dos possíveis caminhos para um maior uso da unidade de destilação é aumentar ou melhorar as unidades de hidrotratamento que estão operando na máxima capacidade.
- c. Dobrar a capacidade da UHDTL fez com que a UHDTP chegasse ao seu limite, sugerindo que um aumento ou melhora na UHDTP aumentaria ainda mais o uso da refinaria.
- d. Além do QAV, o S-500 também atingiu o máximo de demanda do mercado, mostrando que um aumento desse mercado também tem potencial para aumentar o lucro da refinaria.

Cenário 3: Construção de uma UHDTP adicional

Nota-se que, a partir da construção de uma nova unidade de hidrotratamento de diesel pesado, isto é, dobrar a capacidade de 6.000 para 12.000 bbl/dia, possibilita o aumento do volume destilado da refinaria para 83.160 bbl/dia, acréscimo de 6.514 bbl/dia ou 7,8% em comparação com a refinaria que não tem uma UHDTP adicional.

No entanto, o lucro total se mantém estável o que indica que a refinaria consegue produzir mais produtos dentro da especificação, porém isso não a torna mais lucrativa. Além disso, quando se constrói uma UHDTP adicional, a UHDTL passa a operar na sua capacidade máxima. Simulações forçando uma compra mínima superior a do ponto de operação representado no cenário 3, mostram que para que a refinaria opere em capacidades maiores que a atual é necessária a construção de uma UHDTL adicional, já que ela é limitante para a produção de produtos com porcentagem de enxofre dentro das especificações exigidas pelos órgãos reguladores.

Cenário 4: construção de uma segunda UHDTL adicional

A cenário 4 representa a construção de mais uma UHDTL e a sua capacidade total passa para 24.000 bbl/dia. Apesar da produção da unidade de destilação estar em 84.000 bbl/dia, esse valor somente é alcançado colocando-se uma restrição de compra mínima de 84.000 bbl/dia. Chega-se a conclusão que não é vantajoso esse cenário, mesmo com uma UHDTL a mais, comprar mais petróleo e operar em uma capacidade maior da planta, uma vez que a margem de lucro vai diminuindo à medida que se produz mais, como pode ser visto na tabela abaixo, que relaciona a compra mínima de petróleo exigido com o lucro total.

Tabela 6.4: Lucro total em função da compra mínima de petróleo exigida.

Compra mínima (bbl/d)	Lucro total (US\$/dia)
84.000	211.995,27
85.000	211.738,37
86.000	207.963,58
87.000	198.671,86
88.000	188.382,58
95.000	117.147,42
99.000	76.916,10

Uma possível causa para essa queda na margem de lucro na medida em que se obriga uma compra mínima de petróleo maior é o fato de que os produtos mais valiosos (QAV e o S-500) atingem sua demanda máxima de mercado e óleos crus mais caros são utilizados para a produção de derivados cujo valor de mercado é menor. Essa grande diferença de preços de compra e venda justifica a curva quase exponencial observada entre a compra mínima de petróleo e o lucro total da Tabela 6.4.

Como não existe mais nenhum gargalo de capacidade operacional em nenhuma unidade, restam duas alternativas para aumentar o lucro da refinaria. Ou adota-se uma estratégia comercial para desenvolver os mercados locais de QAV e S-500, que já atingiram seus limites ou aumenta-se o preço de venda dos produtos, uma vez que o custo do petróleo é fixado pelo mercado por se tratarem de commodities.

Cenário 5: Aumento da demanda do mercado por QAV e Diesel S-500

No cenário 5, foi simulado uma demanda de mercado de querosene de aviação três vezes maior que o proposto inicialmente (9.000 bbl/dia) e uma demanda de diesel S-500 uma vez e meia maior (15.000 bbl/dia). Nessa simulação, a refinaria consegue operar mais perto da sua capacidade máxima (93%) e com uma margem de lucro 34.000 U\$/dia superior ao cenário anterior. Sendo assim, é vantajoso investir em uma estratégia comercial para aumentar as vendas desses produtos no mercado local.

No entanto, como a margem de lucro por barril está abaixo da necessária para tornar a refinaria viável economicamente (5,00 U\$/bbl). Faz-se necessário então altear os preços de venda.

Cenário 6: Aumento do preço de venda dos produtos

Foram feitas simulações mantendo as unidades de hidrotreatamento extras, uma demanda maior de mercado para QAV, S-500 e aumentos progressivos de 1 U\$/bbl nos preços de venda dos produtos finais. Nota-se que a partir de um aumento de 3 U\$/bbl a refinaria já se torna viável economicamente, com um lucro/bbl maior que 5 dólares. Contudo, ela ainda não atinge uma produção de 100.000 bbl/dia proposta inicialmente. É possível, nesse caso, que a função objetivo tenha atingido algum ponto de mínimo local, o que sugere simular partindo de um ponto inicial diferente.

Tabela 6.5: Relação entre o aumento do preço de venda, lucro total e lucro/bbl.

Aumento do preço de venda (U\$/bbl)	Lucro total (U\$/dia)	Lucro/barril (U\$/bbl)
1	344.077,69	3,70
2	435.272,30	4,68
3	526.466,91	5,66

Cenário 7: Saindo de um ponto de partida diferente

A simulação foi feita novamente, porém saindo de um ponto de partida diferente, isto é, com valores iniciais diferentes para a quantidade de óleo comprada de cada fornecedor. O resultado obtido foi um lucro total 15% maior que o anterior, indicando que o otimizador estava obtendo um máximo local e não global. Além disso, foi possível operar no máximo da refinaria – 100.000 bbl/dia.

Cenário 8: Demandas de mercado originais

Considerando que o cenário 5 foi otimista em relação a um aumento de 300% de demanda de querosene de aviação e 150% de aumento de demanda de mercado de diesel S-500, propõe-se voltar às demandas originais e alterar o ponto de partida para evitar uma solução em um máximo local, como feito no cenário 7. As demais alterações de construção de duas unidades de hidrotreatamento de diesel leve, uma unidade de hidrotreatamento de diesel pesado e o aumento de 3 U\$/bbl no preço de venda dos produtos finais foram mantidas. O resultado final do estudo de caso pode ser observado nas tabelas a seguir. A planta opera com 92% da sua capacidade e compra apenas cinco dos onze óleos disponíveis no mercado. O lucro diário é de U\$ 522.210,22 com lucro por bbl de 5,67 dólares e um custo de 2,94 U\$/bbl, cenário esse que torna a refinaria viável economicamente.

Tabela 6.6: Quantidade de óleo comprada de cada fornecedor.

Óleo Comprado	Quantidade (bbl/dia)
Pennington	35.404,00
Maya	1.858,00
Leona 24	12.749,00
Escalante	30.000,00
Árabe leve	12.120,00

Tabela 6.7: Quantidade de cada produto final produzida.

Produto final	Produção (bbl/dia)
GLP	680,00
GASO	7.000,00
NAFTPQ	6.615,00
QAV	3.000,00
S10	20.078,00
S500	10.000,00
TFM	0,00
CAP	1.000,00
OCB1	43.205,00
GPV	0,00

Tabela 6.8: Indicadores financeiros da refinaria.

Indicador	Valor (U\$/dia)
Lucro total	522.210,22
Lucro/bbl	5,67
Custo/bbl	2,94

7. CONCLUSÕES

Nesse trabalho, o método *SIMPLEX* foi implementado através de uma tradução do algoritmo em Pascal proposto por Kowalik (1983) para a linguagem Fortran. Foram realizados sete testes com modelos existentes na literatura e os resultados foram comparados com as soluções propostas pelos autores. A análise dos resultados indicou que o código em Fortran do método Simplex Revisado foi devidamente implementado e apresentou boa concordância com as soluções encontradas, já que o erro obtido foi próximo a zero em todos os casos.

A resolução desses problemas permitiu ter maior confiança para usar a ferramenta desenvolvida em um estudo de caso mais complexo. O problema de planejamento de produção de uma refinaria de petróleo foi ponto central do estudo realizado. A partir da modelagem proposta para uma refinaria com capacidade de destilação de 100.000 bbl/dia, chegou-se a conclusão que para ela operar no máximo da sua capacidade e com um lucro que torne a sua construção viável economicamente, é necessária a construção de mais duas unidades de hidrotreatamento de diesel leve e uma unidade de hidrotreatamento de diesel pesado. Além disso, é preciso aumentar o preço de venda dos produtos finais em 3 U\$/bbl.

Momentos como os vividos atualmente em que os preços das *commodities* e principalmente do petróleo caíram drasticamente e continuam oscilando dia a dia, mostram a importância desse tipo de estudo. Problemas de indisponibilidade de equipamentos também são corriqueiros no dia a dia e mostram a necessidade de simular o ponto ótimo de operação considerando novas capacidades de produção. Sem uma ferramenta apropriada que permita a resolução diária desse problema de maneira automática, fica inviável ter lucro trabalhando com margens extremamente apertadas.

Infelizmente, devido à complexidade do estudo de caso, não foi possível utilizar o código implementado para resolver todo o problema da refinaria devido à dificuldade em criar os arquivos de entrada de maneira manual. Propõe-se para trabalhos futuros, desenvolver um algoritmo capaz de criar as matrizes de entrada com base nas restrições impostas pelo problema de uma maneira mais fácil que a atual. Dessa forma, será possível utilizá-lo para resolver também o problema completo da forma que foi proposto inicialmente.

É importante destacar como as simplificações dos modelos reais devem ser feitas com bastante cautela. O modelo simplificado utilizado nesse trabalho com apenas 67 variáveis e restrições apresentou um lucro máximo de R\$ 1.447.507,1 enquanto que a resolução do problema completo através da ferramenta GRG não linear apresentou um lucro máximo de R\$ 180.539,44. Essa diferença se deu devido à não existência de restrições ambientais, por exemplo, que limitam bastante a produção e o lucro das indústrias. Faz parte do papel do Engenheiro Químico analisar quais simplificações ou linearizações podem ser feitas sem que o problema perca a capacidade de representar a realidade do processo estudado. De acordo com a pesquisa de campo realizada, a modelagem completa do problema apresenta uma verossimilhança com um processo real e a queda significativa no lucro em relação à modelagem simplificada é bastante razoável.

Propõe-se também a criação de mais módulos de otimização para o programa como, por exemplo, algoritmos de programação não linear e programação linear inteira mista, que vão reduzir cada vez mais a necessidade de simplificações do modelo. Simplificações e linearizações essas que foram e são umas das maiores dificuldades nesse tipo de estudo.

Pelo fato de ser código gratuito e com acesso livre ao código fonte, no futuro, a FEQ/Unicamp terá disponível um software completo de otimização que poderá ser utilizado para pesquisa e ensino de graduação e pós-graduação como suporte nos cursos dessa área de ensino. Alunos do curso de EQ991 – Análise de Simulação de Processos – inclusive já tiveram a oportunidade de utilizar essa ferramenta como forma de apoio didático para resolução dos estudos de caso propostos nesse trabalho e outros problemas trabalhados em sala de aula.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABADIE, E. – **Processos de refino: curso de formação de operadores de refinaria** – Curitiba, 2002, disponível em: http://www.tecnicodepetroleo.ufpr.br/apostilas/processos_derefino.pdf.

Adler I., Resende M.G.C., Veiga G., Karmarkar N. – **An implementation of Karmarkar's algorithm for linear programming** – Mathematical Programming, 44, 297-335, 1989.

ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, Ministério de Minas e Energia – **Os preços dos combustíveis no mercado brasileiro** – Brasília, 2014, disponível em: www.anp.gov.br.

ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, Ministério de Minas e Energia – **Especificações da gasolina comercial** – Resolução nº 38, Brasília, 2009.

ANP, Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, Ministério de Minas e Energia – **Especificações do querosene de aviação, QAV-1** – Resolução nº 37, Brasília, 2009.

Anstreicher K.M. – **Linear programming in $O(n \ln n)$ operations**, CORE Discussion Paper 9746, Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgium, 1999.

Biegler L.T., Grossmann I.E. – **Retrospective on optimization** – Computer and Chemical Engineering, 28, 1169-1192, 2004.

Boldrini, J.L., Costa S.I.R., Figueiredo V.L., Wetzler H.G. – **Álgebra Linear** – Editora Harper & Row do Brasil, Terceira edição, São Paulo, 1980.

Bregalda, P.F., Oliveira, A.A.F, Bornstein, C.T. – **Introdução à Programação Linear** – Editora Campus Ltda., Segunda edição, Rio de Janeiro, 1983.

Brasil, N. I., Araújo, M. A. S., Sousa, E. C. M – **Processamento de petróleo e gás: petróleo e seus derivados, processamento primário, processo de refino, petroquímica, meio ambiente** – Editora LTC, Rio de Janeiro, 2012.

Bueno C. – **Planejamento Operacional de Refinarias** – Dissertação – Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, 2003.

Canelas, A. L. – **Evolução da importância econômica da indústria de petróleo e gás natural no Brasil: contribuição a variáveis macroeconômicas** – Dissertação – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011.

Dantzig, G. B. – **Linear programming and extensions** – Princeton University Press, 1963.

Dolbear, G. E., Robinson, P.R. – **Hydroprocessing of heavy oils and residue** – Commercial Hydrotreating and Hydrocracking, Capítulo 10, CRC Press, 2007.

ENI – **Trading Shipping Crude Assays** – 2014, disponível em: http://www.eni.com/en_IT/company/operations-strategies/trading-shipping/trading-shipping-crude-assays/trading-shipping-crude-assays-downloads.shtml

Gao X., Shang C., Jiang Y., Chen T., Huang D. – **Refinery scheduling with varying crude: a deep belief network classification and multimodel approach** – AIChE J, 60:2525–32, 2014.

García N., Ruiz-Ferrenia R., Caballero J.A. – **Teaching mathematical modeling software for multiobjective optimization in chemical engineering courses** – Education for Chemical Engineers, 7, 169-180, 2012.

Gondzio J. – **Interior Point Methods 25 Years Later** – European Journal of Operational Research, 218, 587-601, 2012.

Gropo R.A – **Desenvolvimento e implantação do balanço energético de uma central petroquímica visando a otimização da programação de produção** – Dissertação, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2004.

Grossmann I.E., Biegler L.T. – **Future perspective on optimization** – Computer and Chemical Engineering, 28, 1193-1218, 2004.

Hartmann, J.C.M. – **Decision-making and modeling in petroleum refining** – Hydrocarbon Processin, 1997.

Himmelblau D.M, Edgar, T.F., Ladson, L.S. – **Optimization of Chemical Processes** – Editora McGraw-Hill Higher Education, Segunda edição, Nova York, 2001.

Illukpitiya P., Yanagida J.F., Ogoshi R., Uehara G. – **Sugar-ethanol-electricity co-generation in Hawai'i: An application of linear programming (LP) for optimizing strategies** – Biomass & Bioenergy, vol. 48, p.203-212, 2013.

Jones, D. S. J., Pujadó, P.R. – **Handbook of petroleum processing** – New York: Springer, 2006.

Kilkas A.C., Hutchison H.P. – **Process optimization using linear models** – Computer and Chemical Engineering, vol.4, p.39-48, 1980.

Kowalik, J.S., Syslo, M.M, Deo, N. – **Discrete Optimization Algorithms with Pascal programs** – Editora Prentice-Hall, New Jersey, 1983.

Law K.M.Y., Lee V.C.S., et al. – **Learning motivation in e-learning facilitated computer programming courses** – Computational Education, 55 (1), 218–228, 2010.

Leite, L. F. M. – **Estudos de preparo e caracterização de asfaltos modificados por polímero** – Tese – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 1999.

MAPA, Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento, **Portaria nº 7**, Brasília, 2010.

Moro, L. F. L. – **Process Technology in the Petroleum Refining Industry, current situation and future trends** – Computers and Chemical Engineering, 27, 8, 1303-1305, 2003.

Pinto J.M., Joly M., Moro L.F.L. – **Planning and scheduling models for refinery operations** – Computer and Chemical Engineering, 24:2259–76, 2000.

Perkins J.D. – **Chemical Engineering – the First 100 Years** – Chemical Engineering: Visions of the World, p. 33-35, 2003.

Petrobras – **Investimentos no Abastecimento**. Abastecimento/Planejamento Corporativo/Gestão de Portfólio, 2007, disponível em <http://www.petrobras.com.br>.

Potra F.A, Wright S.J. – **Interior-point Methods** – Journal of Computational and Applied Mathematics, 124, 281-302, 2000.

Nguyen D.T., Bai Y., Qin J., Han B., Hu Y. – **Computational aspects of linear programming Simplex method** – Advanced in Engineering Software, 31, 539-545, 2000.

Sahdev, K. K. – **Petroleum Refinery Planning and Optimization Using Linear Programming** – 2010, disponível em <http://www.cheresources.com>.

Shah N.K., Lerapetritou M.G. – **Short-term scheduling of a large-scale oil-refinery operations: incorporating logistics details** – AIChE J, 57:1570–84, 2011.

Shobrys D.E., White D.C. – **Planning, scheduling and control systems: why cannot they work together** – Computer and Chemical Engineering, 26, 149-60, 2002.

Silvy, R.P. – **Refining catalyst market begins to recover in 2010** – Oil and Gas Journal, p.115, 2010.

Speight, J. G. – **The chemistry and technology of petroleum** – New York: Marcel Dekker, 1991.

Wright M. H. – **The Interior-point Revolution in Optimization: History, Recent Developments, and Lasting Consequences** – American Mathematical Society, v. 42, n.1, p. 39-56, 2004.

Zhang N, Zhu XX. – **A novel modeling and decomposition strategy for overall refinery optimization** – Computer and Chemical Engineering, 24:1543–8, 2000.

APÊNDICE A

CÓDIGO FONTE

```

PROGRAM simplex
  IMPLICIT NONE

  !**Variables Definitions**!

  !Input variables
  integer M,N, i_max, j_max
  parameter (i_max=200)
  parameter (j_max=200)
  real EPS
  real A(i_max,j_max),C(j_max),B(i_max)

  !Output variables
  real F
  integer W(i_max)
  real X(i_max)
  logical NOFEAS, NOSOL

  !Support variables
  integer i,j,K,L,P,Q
  real D,R,S
  real Y(i_max),U(i_max,j_max)
  logical EX,PHASE,CONT

  !Opening Result file

  OPEN(UNIT = 4, FILE = "saida.txt")

  Write(4,*)
  Write(4,*)
  Write(4,*) '                OPTIMISATION TOOL
  ,
  Write(4,*) '                University of Campinas
  ,
  Write(4,*) '                Faculty of Chemical Engineerig
  ,
  Write(4,*) '                Savio S.V. Vianna
  ,
  Write(4,*) '                Caio Oliveira Biondi
  ,
  Write(4,*)

```

```

Write(4,*)'Result file;

Write(4,*)

! **Inputs**!

print*, "Type the number of constraints: "
  read*, M
Write(4,*)'Type the number of constraints:', M

print*, "Type the number of variables:"
  read*, N
Write(4,*)'Type the number of variables:', N

print*, "Type the maximum tolerance accepted:"
  read*, EPS
Write(4,*)'Type the maximum tolerance accepted:', EPS

! Read files from computer and print matrices A, B and
C
open (1,file="matrizA.txt", status="old")
  DO i=1,M
    read (1,*) (A(i,j), j=1,N)
  END DO
close(1)

open (2,file="vetorB.txt", status="old")
  DO i=1,M
    read (2,*) B(i)
  END DO
close(2)
Write(4,*)
Write(4,*)'The coefficients of Ax=b are:'
print*, "The coefficients of Ax=b are:"
DO i=1,M
  print*, (A(i,j), j=1,N), " =", B(i)
  Write(4,*) (A(i,j), j=1,N), " =", B(i)
END DO

Write(4,*)
Write(4,*)'The Objective Function to be minimized is:'
print*, "The Objective Function to be minimized is:"
open (3,file="vetorC.txt", status="old")
  DO j=1,N

```



```

        read (3,*) C(j)
    END DO
close(3)

print*, (C(j), j=1,N)
Write(4,*) (C(j), j=1,N)

! **Simplex Algorithm**!

NOFEAS = .FALSE.
NOSOL = .FALSE.
PHASE = .TRUE.
P = M+2
Q = M+2
K = M+1

!Insert lines M+1 and M+2 at matrix A
DO j=1,N
    A(K,j) = C(j)
    S = 0.0
    DO i=1,M
        S = S - A(i,j)
    END DO
    A(P,j) = S
END DO
!DO i=1,P
! print*, (A(i,j), j=1,N) !Print matrix A with M+2
lines
!END DO

!First Basic Solution
S = 0.0
DO i=1,M
    W(i) = N+i
    R = B(i)
    X(i) = R
    S = S-R
END DO
X(K) = 0.0
X(P) = S

!Introduces matrix U
DO i=1,P
    DO j=1,P

```

```

        U(i,j) = 0.0
    END DO
        U(i,i) = 1.0
    END DO

!Visualization of the problem before the
computational steps

Write(4,*)
    print*, "The problem in its standard form:"
Write(4,*) 'The problem in its standard form:'
DO i=1,P
    print*, (A(i,j), j=1,N), (U(i,j), j=1,P), " =", X(i)
    Write(4,*) (A(i,j), j=1,N), (U(i,j), j=1,P), " =",
X(i)
END DO

!Simplex Steps
CONT = .TRUE.
DO WHILE (CONT)

    !Condition to change to phase 2
    IF ((X(P) .GE. -EPS) .AND. PHASE) THEN !Step 1: if
Xn+m+2 >= 0, change to phase 2
        PHASE = .FALSE.
        Q = M+1 !Eliminate the last row
    END IF

    !Phase 1 or 2
    D = 0.0
    DO j=1,N
        S = 0.0
        DO i=1,P
            S = S+U(Q,i)*A(i,j) !Step 1
        END DO
        IF (D .GT. S) THEN !Step 2: choose the minimum
value of S calculated on step 1
            D = S
            K = J !Column that the minimum value of S
was found
        END IF
    END DO
    IF (D .GT. (-EPS)) THEN !That means it was not
found an S negative

```

```

CONT = .FALSE.
IF (PHASE) THEN !If PHASE = .TRUE. is because the
algorithm was still in phase 1
    NOFEAS = .TRUE.
    print*, "There is no feasible solution for this
problem"
    Write(4,*)
    Write(4,*) 'There is no feasible solution for
this problem'
ELSE !It is already in phase 2 and the Xn+m+1 is
at its maximum
    F = -X(Q)
    print*, "The optimal value of the objective
function is", F
    Write(4,*)
    Write(4,*) 'The optimal value of the objective
function is:', F
    print*, "The optimal solution for this problem
is:"
    Write(4,*) 'The optimal solution for this
problem is:'
    DO i=1,M
        print*, "x", W(i), " =", X(i)
        Write(4,*) "x", W(i), " =", X(i)
    END DO
END IF
ELSE
DO i=1,Q
    S = 0.0
    DO j=1,P
        S = S+U(i,j)*A(j,K) !Step 3
    END DO
    Y(i) = S
END DO
EX = .TRUE.
DO i=1,M
    IF (Y(i) .GE. EPS) THEN
        S = X(i)/Y(i) !Step 4
        IF (EX .OR. (S .LT. D)) THEN
            D = S
            L = i
        END IF
    END IF
EX = .FALSE.
END IF

```

```

END DO
IF (EX) THEN
  NOSOL = .TRUE.
  CONT = .FALSE.
  print*, "There is no solution for this problem"
  Write(4,*)'There is no solution for this
problem'
ELSE !Step 5
  W(L) = K
  S = (1.0)/Y(L)
  DO j=1,M
    U(L,j) = U(L,j)*S
  END DO
  IF (L .EQ. 1) THEN
    i = 2
  ELSE
    i = 1
  END IF
  DO WHILE (Q .GE. i)
    S = Y(i)
    X(i) = X(i)-D*S
    DO j=1,M
      U(i,j) = U(i,j) - U(L,j)*S
    END DO
    IF (i .EQ. (L-1)) THEN
      i = i+2
    ELSE
      i = i+1
    END IF
  END DO
  X(L) = D
END IF
END IF
END DO
END

```

APÊNDICE B

ARQUIVOS DE SAÍDA

1. Problema do Kowalik (1983)

OPTIMISATION TOOL
 University of Campinas
 Faculty of Chemical Engineerig
 Savio S.V. Vianna
 Caio Oliveira Biondi

Result file;

Type the number of constraints: 3

Type the number of variables: 4

Type the maximum tolerance accepted: 0.00100000005

The coefficients of $Ax=b$ are:

1. 2. 3. 0. = 15.

2. 1. 5. 0. = 20.

1. 2. 1. 1. = 10.

The Objective Function to be minimized is:

-1. -2. -3. 1.

The problem in its standard form:

1. 2. 3. 0. 1. 0. 0. 0. 0. = 15.

2. 1. 5. 0. 0. 1. 0. 0. 0. = 20.

1. 2. 1. 1. 0. 0. 1. 0. 0. = 10.

-1. -2. -3. 1. 0. 0. 0. 1. 0. = 0.

-4. -5. -9. -1. 0. 0. 0. 0. 1. = -45.

The optimal value of the objective function is: -15.

The optimal solution for this problem is:

x 2 = 2.5

x 3 = 2.5

x 1 = 2.5

2. Problema do Bregalda (1983)

OPTIMISATION TOOL
University of Campinas
Faculty of Chemical Engineerig
Savio S.V. Vianna
Caio Oliveira Biondi

Result file;

Type the number of constraints: 2

Type the number of variables: 2

Type the maximum tolerance accepted: 9.99999975E-006

The coefficients of $Ax=b$ are:

3. 5. = 15.

5. 2. = 10.

The Objective Function to be minimized is:

-5. -3.

The problem in its standard form:

3. 5. 1. 0. 0. 0. = 15.

5. 2. 0. 1. 0. 0. = 10.

-5. -3. 0. 0. 1. 0. = 0.

-8. -7. 0. 0. 0. 1. = -25.

The optimal value of the objective function is: -12.3684216

The optimal solution for this problem is:

x 2 = 2.36842108

x 1 = 1.0526315

3. Problema do Boldrini (1980)

OPTIMISATION TOOL
University of Campinas
Faculty of Chemical Engineerig
Savio S.V. Vianna
Caio Oliveira Biondi

Result file;

Type the number of constraints: 2

Type the number of variables: 2

Type the maximum tolerance accepted: 9.99999975E-006

The coefficients of $Ax=b$ are:

5. 20. = 400.

10. 15. = 450.

The Objective Function to be minimized is:

-4500. -8000.

The problem in its standard form:

5. 20. 1. 0. 0. 0. = 400.

10. 15. 0. 1. 0. 0. = 450.

-4500. -8000. 0. 0. 1. 0. = 0.

-15. -35. 0. 0. 0. 1. = -850.

The optimal value of the objective function is: -220000.

The optimal solution for this problem is:

x 2 = 14.

x 1 = 24.

4. Problema de Himmelblau (2001)

OPTIMISATION TOOL
University of Campinas
Faculty of Chemical Engineerig
Savio S.V. Vianna
Caio Oliveira Biondi

Result file;

Type the number of constraints: 8

Type the number of variables: 13

Type the maximum tolerance accepted: 9.99999975E-006

The coefficients of $Ax=b$ are:

```

1.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 100.
0.  1.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 100.
0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  = 100.
0.  0.  0.  1.  1.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  = 200.
0.6 0.5 0.3 0.4 0.4 0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  = 170.
0.2 0.2 0.3 0.3 0.1 0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  = 85.
0.1 0.2 0.3 0.2 0.2 0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  = 85.
0.  0.  0.  0.  0.2 0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  = 20.

```

The Objective Function to be minimized is:

```
-14. -8. -4. -2. -8.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.
```

The problem in its standard form:

```

1.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 100.
0.  1.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 100.
0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 100.
0.  0.  0.  1.  1.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  = 200.
0.6 0.5 0.3 0.4 0.4 0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 170.
0.2 0.2 0.3 0.3 0.1 0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 85.
0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 85.
0.1 0.2 0.3 0.2 0.2 0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 85.
0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 20.
-14. -8. -4. -2. -8.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = 0.
-1.9 -1.9 -1.9 -1.9 -1.9 -1. -1. -1. -1. -1. -1. -1. -1.  0.  0.  0.  = -860.
0.  0.  0.  0.  0.  0.  1.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  0.  = -860.

```

The optimal value of the objective function is: -3266.67

The optimal solution for this problem is:

x 1 = 100.

x 2 = 100.

x 3 = 66.67

x 4 = 0.

x 5 = 100.

5. Problema de Himmelblau (2001)

OPTIMISATION TOOL
University of Campinas
Faculty of Chemical Engineerig
Savio S.V. Vianna
Caio Oliveira Biondi

Result file;

Type the number of constraints: 21

Type the number of variables: 29

Type the maximum tolerance accepted: 9.99999975E-005

The coefficients of $Ax=b$ are:

```

1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. -1. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1.
0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. -1. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. -1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. -1. 0. -1. 0. 1. -1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. -1. 1. 0. 1. 0. 0. 1. -1. -1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. -1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. -1. -1. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. -1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. -1. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. -1. 0. 0. 1. -1. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. -1. 1. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 1. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. -1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. -1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. -1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
1. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. -1. = 24550.
-3413. -1267.8 -192. 1359.8 0. 0. 0. 0. 0. 0. -1251.40 0. 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. = 0.
0. 0. 0. 0. -3413. 1359.8 -1251.4 0. 0. 0. 0. 0. -1267.8 0. 0.
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. = 0.

```

The Objective Function to be minimized is:

```
0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.00261400011 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0.0239000004 0.00982499961 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0. 0.
0. 0. 0.
```

The optimal value of the objective function is: 1270.27234

The optimal solution for this problem is:

```
x 18 = 3750.
x 1 = 6250.
x 19 = 55671.2031
x 20 = 53830.2656
x 21 = 123830.266
x 22 = 1939.28711
x 5 = 7060.7124
x 16 = 760.712524
x 25 = 41377.0313
x 8 = 380328.719
x 4 = 136328.797
x 10 = 271536.
x 6 = 243999.906
x 43 = 0.
x 7 = 100622.969
x 15 = 11239.2871
x 2 = 128159.078
x 23 = 4060.71265
x 13 = 143376.906
x 3 = 8169.72852
x 11 = 100622.953
```

APÊNDICE C

CORTE DOS TIPOS DE PETRÓLEO E SUAS CARACTERÍSTICAS (ENI, 2014)

Cortes		PETRÓLEOS NIGERIANOS			
Códigos	Propriedades	ABO 3	BRASS RIVER	BONNY LIGHT	PENNINGTON
GLP					
VBAL	Rendimento (volume)	0,71	1,7	1,07	1,26
NAFTA LEVE					
VBAL	Rendimento (volume)	14,74	15,68	11,87	10,8
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,7094	0,7112	0,7068	0,7096
NAFTA PESADA					
VBAL	Rendimento (volume)	10,31	10	10,01	9,92
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,7728	0,7679	0,7741	0,7728
QUEROSENE					
VBAL	Rendimento (volume)	17,91	17,2	17,35	21,87
ISPG	Densidade 15°C/15°C (g/cm ³)	0,821	0,82	0,8209	0,8322
ISUL	Enxofre total (% de massa)	0,04	0,014	0,018	0,018
IV38	Viscosidade (cinemática) a 38°C	1,14	1,06	1,08	1,07
IV5	Índice de Viscosidade	0,018927	0,0084	0,01058	0,00916
DIESEL LEVE					
VBAL	Rendimento (volume)	24,65	22,9	25,43	27,63
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,8637	0,8738	0,8696	0,8718
ISUL	Enxofre total (% de massa)	0,11	0,079	0,122	0,085
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	3,03	1,87	2,44	2,94
IV5	Índice de Viscosidade	0,16589	0,1453	0,16459	0,16148
DIESEL PESADO					
VBAL	Rendimento (volume)	8,13	10,24	9,1	8,8
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,9024	0,9034	0,9043	0,9078
ISUL	Enxofre total	0,191	0,168	0,254	0,158
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	8,58	7,67	9,65	9,33
IV5	Índice de Viscosidade	0,26806	0,25888	0,2776	0,27623
GASÓLEO LEVE					
VBAL	Rendimento (volume)	4,31	5,07	4,75	4,55
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,9316	0,9257	0,925	0,9325
ISUL	Enxofre total	0,256	0,205	0,285	0,198
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	21,98	19,38	25,7	25,9
IV5	Índice de Viscosidade	0,34303	0,3349	0,35314	0,35526
GASÓLEO PESADO					
VBAL	Rendimento (volume)	13,11	13,06	14,82	12
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,9656	0,9482	0,9499	0,9507
ISUL	Enxofre total	0,341	0,281	0,358	0,249
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	125,73	168,37	151,46	140,88
IV5	Índice de Viscosidade	0,44857	0,46385	0,45717	0,45307
RESÍDUO DE VÁCUO					
VBAL	Rendimento (volume)	6,08	3,88	5,3	2,75
ISPG	Densidade 15°C/15°C	1,0173	1,0193	1,018	1,0165
ISUL	Enxofre total	0,511	0,592	0,724	0,372
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	7925666,39	145736	4846616	270042,8
IV5	Índice de Viscosidade	0,72817	0,666	0,72082	0,67427

Cortes Código	Propriedades	ARGENTINO		ÁRABE
		ESCALANTE	LEVE	PESADO
GLP				
VBAL	Rendimento (volume)	0,15	1,07	1,15
NAFTA LEVE				
VBAL	Rendimento (volume)	3,85	11,31	9,08
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,6912	0,6781	0,6729
NAFTA PESADA				
VBAL	Rendimento (volume)	4,29	8,17	6,37
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,7382	0,7409	0,7358
QUEROSENE				
VBAL	Rendimento (volume)	8,98	15,62	12,65
ISPG	Densidade 15°C/15°C (g/cm ³)	0,7926	0,7931	0,7899
ISUL	Enxofre total (% de massa)	0,007	0,144	0,171
IV38	Viscosidade (cinemática) a 38°C	1,26	1	0,91
IV5	Índice de Viscosidade	0,0319615	0,0001871	-0,0134543
DIESEL LEVE				
VBAL	Rendimento (volume)	13,44	17,36	15,08
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,8474	0,8467	0,8466
ISUL	Enxofre total (% de massa)	0,055	1,002	1,245
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	3,31	1,74	2,11
IV5	Índice de Viscosidade	0,1750303	0,1428477	0,1457834
DIESEL PESADO				
VBAL	Rendimento (volume)	7,07	7,82	7,43
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,8828	0,8929	0,8955
ISUL	Enxofre total	0,146	2,141	2,543
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	9,59	7,28	7,6
IV5	Índice de Viscosidade	0,2781557	0,2514758	0,2566492
GASÓLEO LEVE				
VBAL	Rendimento (volume)	4,52	4,53	4,27
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,9019	0,9147	0,9193
ISUL	Enxofre total	0,184	2,409	2,891
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	19,85	13,07	16,15
IV5	Índice de Viscosidade	0,3356992	0,3012542	0,3196641
GASÓLEO PESADO				
VBAL	Rendimento (volume)	21,9	18,08	19,33
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,9249	0,9446	0,9517
ISUL	Enxofre total	0,224	2,72	3,492
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	78,53	58,56	116,65
IV5	Índice de Viscosidade	0,4222846	0,4026875	0,4435261
RESÍDUO DE VÁCUO				
VBAL	Rendimento (volume)	35,77	15,75	24,2
ISPG	Densidade 15°C/15°C	1,0005	1,0289	1,0552
ISUL	Enxofre total	0,292	4,173	6,149
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	262851726,7	277316,6	279858048,5
IV5	Índice de Viscosidade	0,7633356	0,6739418	0,765053

Cortes		MAR DO NORTE	MEXICANO	VENEZUELANO	
Códigos	Propriedade	BRENT	MAYA	MEREY 16	LEONA 24
GLP					
VBAL	Rendimento (volume)	1,53	0,25	0,18	0,41
NAFTA LEVE					
VBAL	Rendimento (volume)	13,87	5,72	3,36	6,27
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,703	0,6917	0,707	0,7036
NAFTA PESADA					
VBAL	Rendimento (volume)	10,16	5,33	3,85	6,47
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,7578	0,7531	0,7707	0,7652
QUEROSENE					
VBAL	Rendimento (volume)	15,35	11,35	9,12	11,49
ISPG	Densidade 15°C/15°C (g/cm³)	0,7995	0,7934	0,813	0,81
ISUL	Enxofre total (% de massa)	0,018	0,611	0,128	0,1
IV38	Viscosidade (cinemática) a 38°C	1,01	0,92	1,1	0,93
IV5	Índice de Viscosidade	0,0019319	-0,0119702	0,0133193	0,01008
DIESEL LEVE					
VBAL	Rendimento (volume)	18,06	12,38	15,58	16,91
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,8443	0,8549	0,8756	0,8665
ISUL	Enxofre total (% de massa)	0,178	1,876	0,999	0,794
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	1,82	1,67	3,14	1,98
IV5	Índice de Viscosidade	0,1557683	0,1373584	0,1701136	0,15757
DIESEL PESADO					
VBAL	Rendimento (volume)	7,99	6,88	8,78	8,86
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,8759	0,8929	0,9203	0,907
ISUL	Enxofre total	0,427	2,699	2,032	1,606
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	7,58	6,5	11,41	11,42
IV5	Índice de Viscosidade	0,25547	0,24305	0,29447	0,29522
GASÓLEO LEVE					
VBAL	Rendimento (volume)	4,55	4,26	5,36	5,15
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,8946	0,9181	0,94308	0,929
ISUL	Enxofre total	0,526	2,925	2,317	1,873
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	15,08	14,19	27,43	20,62
IV5	Índice de Viscosidade	0,3131	0,31112	0,36092	0,3398
GASÓLEO PESADO					
VBAL	Rendimento (volume)	17,86	21,37	23,67	22,08
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,9187	0,957	0,9695	0,9566
ISUL	Enxofre total	0,69	3,517	2,739	2,29
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	58,77	102,29	224,94	113,65
IV5	Índice de Viscosidade	0,40424	0,44113	0,47874	0,44384
RESÍDUO DE VÁCUO					
VBAL	Rendimento (volume)	10,06	32,46	30,05	22,22
ISPG	Densidade 15°C/15°C	0,9943	1,0789	1,0691	1,0596
ISUL	Enxofre total	1,315	6,27	4,358	3,898
IV50	Viscosidade (cinemática) a 50°C	24533,41	35799588561	81096926059	1,4E+11
IV5	Índice de Viscosidade	0,62246	0,8007	0,80776	0,81166