Universidade Federal do Rio de Janeiro
Escola de Química
Programa de Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos

Avaliação da Indústria Petroquímica no Brasil: Desenvolvimento de Modelo via Programação Matemática

Flávio Leite Loução Junior

Orientadores:

Prof. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, D.Sc.

Prof. Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Rio de Janeiro
2016

Avaliação da Indústria Petroquímica no Brasil: Desenvolvimento de Modelo via Programação Matemática

Flávio Leite Loução Junior

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte integrante dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (M.Sc.).

Orientadores:

Prof. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, D.Sc.

Prof. Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Rio de Janeiro
2016

CIP - Catalogação na Publicação

LL886a

Loução Jr, Flávio Leite
Avaliação da Indústria Petroquímica no Brasil: Desenvolvimento de Modelo via Programação Matemática / Flávio Leite Loução Jr. -- Rio de Janeiro, 2016.
124 f.

Orientadora: Fernando Luiz Pellegrini Pessoa.
Coorientadora: Heloísa Lajas Sanches.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Coordenação dos Programas de Pós Graduação em Engenharia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 2016.

1. Planejamento Petroquímico. 2. Otimização de Superestrutura. 3. Avaliação Tecnológica. 4. Modelagem da Indústria. 5. Programação Matemática. I. Pessoa, Fernando Luiz Pellegrini , orient. II. Sanches, Heloísa Lajas , coorient. III. Título.

Elaborado pelo Sistema de Geração Automática da UFRJ com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Avaliação da Indústria Petroquímica no Brasil: Desenvolvimento de Modelo via Programação Matemática

Flávio Leite Loução Junior

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro como parte integrante dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (M.Sc.).

Aprovado por:

_____

Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

_____

Flávia Chaves Alves, D.Sc.

_____

Reinaldo Coelho Mirre, D.Sc.

Orientado por:

_____

Fernando L. Pellegrini Pessoa, D.Sc.

_____

Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Fevereiro de 2016

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, tenho o dever de agradecer à Deus pelas oportunidades que tive na vida de estudar e me tornar cada vez mais capaz.

Aos meus pais, Flávio e Andréa, que sempre tiveram confiança na minha capacidade e orgulho das minhas conquistas. Estes me possibilitaram mais uma vez que eu me mantivesse focado no término do mestrado e nos meus objetivos profissionais.

Ao meu irmão, Kaike, que apesar da pouca idade, mais uma vez me apoiou no desenvolvimento deste trabalho. Também à minha noiva, Joicy, que sempre se mostrou preocupada e interessada, dando muita força para que este trabalho fosse finalizado.

À professora Heloísa Sanches que me tranquilizou nos momentos onde estive mais preocupado e desanimado, sempre me mostrando que eu era capaz e que tudo ia se resolver. Toda confiança depositada no meu trabalho me deu muita força para conciliar meu trabalho como engenheiro ao desenvolvimento desta dissertação. Ao professor Fernando Pellegrini pela oportunidade e confiança no desenvolvimento deste trabalho, pelo apoio e também pela confiança.

Aos amigos da Radix que sempre me aconselharam e me deixaram à vontade para resolver as questões do mestrado sempre que necessário.

Aos examinadores que aceitaram fazer parte deste trabalho que significa muito para mim. Todos contribuíram na defesa do projeto final e certamente farão novas contribuições de muita significância para que esta dissertação possa gerar um trabalho de doutorado. Em especial a professora Flávia Alves, pela ajuda e atenção dispensada no início do trabalho na fase de estimativa de parâmetros.

Cada contribuição foi de extrema importância no desenvolvimento deste trabalho.

Loução Jr., Flávio Leite, **Avaliação da Indústria Petroquímica no Brasil: Desenvolvimento de Modelo via Programação Matemática**. Orientadores: Fernando Luiz Pellegrini Pessoa e Heloísa Lajas Sanches. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2016, Dissertação (Mestrado).

AVALIAÇÃO DA INDÚSTRIA PETROQUÍMICA NO BRASIL: DESENVOLVIMENTO DE MODELO VIA PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA

Flávio Leite Loução Junior
Fevereiro, 2016

Orientadores: Prof. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, D.Sc.
Prof. Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Diante das expectativas em torno do potencial de geração de recursos das reservas do pré-sal, o setor petroquímico está em evidência, mesmo que ainda hajam dificuldades no que se refere à exploração destas reservas. Neste cenário, diante das frequentes flutuações econômicas inerentes ao setor de óleo e gás, um modelo matemático da indústria petroquímica do Brasil torna o planejamento de investimentos cada vez mais ágil e eficiente, permitindo ações mais efetivas no desenvolvimento deste segmento da indústria. Apresentaram-se em diversos trabalhos modelos de indústrias químicas de diferentes países, aliados a diferentes metodologias para apoio à tomada de decisão, mas nenhum destes utilizados no Brasil. O objetivo deste trabalho foieliminar as inviabilidades encontradas na primeira tentativa de modelagem e avaliar possíveis cenários da indústria petroquímica brasileira. Foram simulados alguns casos para encontrar o principal gargalo deste setor no Brasil, ou seja, a qual matéria-prima a estrutura deste segmento é mais sensível. Além disso, casos de escassez de matéria-prima também foram analisados. O modelo proposto no livro *Petrochemical Technology Assessment* foi escolhido para a realização da análise da indústria petroquímica brasileira. Apesar da indisponibilidade da maior parte dos dados e parâmetros de entrada do modelo e da desatualização dos dados técnicos, os valores referentes aos custos de processo foram estimados com base em dados da ABIQUIM e da ANP. O corte final proposto para o setor petroquímico é composto por 60 produtos petroquímicos e 86 rotas tecnológicas. As simulações indicaram novos cortes para a petroquímica nacional com a exclusão de alguns produtos e processos quando na variação do fornecimento de algumas matérias-primas. Além disso, as simulações mostraram que o custo anual é mais sensível às variações no preço da nafta do que de qualquer outra matéria-prima ou mesmo do que o valor da tarifa de energia. Também foi possível observar quais produtos foram considerados como importação na superestrutura ótima.

Loução Jr., Flávio Leite, **Industry Petrochemical Assessment in Brazil: Development of Model via Programing Mathematics**. Supervisors: Fernando Luiz Pellegrini Pessoa and Heloísa Lajas Sanches. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2016, Dissertation (Master of Science).

PETROCHEMICAL INDUSTRY ASSESSMENT IN BRAZIL: DEVELOPMENT OF MODEL VIA PROGRAMMING MATHEMATICS

Flávio Leite Loução Junior
February, 2016

Supervisors: Prof. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, D.Sc.
Prof. Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

On the expectations surrounding the potential of generating resources of the pre-salt reserves, the petrochemical industry is in evidence, although there are difficulties in relation to the exploration of these reserves. In this scenario, the frequent economic fluctuations inherent in the oil and gas sector, shows that a mathematical model of Brazil's petrochemical industry makes investment planning increasingly agile and efficient, allowing more effective action in the development of this industry. Several authors has presented models of the petrochemical industries in several countries, which have been applied to different methodologies to support decision-making. However, none of these presented a model of the brazilian petrochemical industry. The objective of this work is to eliminate the infeasibilities found on the first trying to modeling and evaluating some possible scenarios of the Brazilian petrochemical industry. Some scenarios were simulated to find the main bottleneck in this sector in Brazil, in other words, which raw material the structure of this segment is more sensitive. Furthermore, cases lack of raw material were also analyzed. Furthermore, cases lack of raw material were also analyzed. The model proposed in the book Petrochemical Technology Assessment was chosen to carry out the analysis of the brazilian petrochemical industry. Despite the unavailability of most model input parameters and the outdating of the technical data, the values for the process costs were estimated based on data from ABIQUIM and ANP. The final superstructure proposed for the petrochemical industry is composed of 60 petrochemicals and 86 technological routes. The simulations indicated further cuts to domestic petrochemical to the exclusion of some products and processes when the variation of the supply of certain raw materials. In addition, the simulations showed that the annual cost is more sensitive to variations in naphtha price than any other raw material or even the value of the electricity. It was also possible to observe which products were considered as imports into the optimal superstructure.

SUMÁRIO

CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO 1

CAPÍTULO II – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 5

II.1 – Modelos tradicionais 5

II.2 – Programação linear - Simplex 8

II.3 – Pesquisas relacionadas 11

CAPÍTULO III – METODOLOGIA 20

III.1 – O problema de otimização 20

III.2 – Estimativa de parâmetros do modelo 21

III.2.1 – Estimativa da demanda (D_i) 23

III.2.2 – Estimativa do fornecimento (S_i) 24

III.2.3 – Estimativa do preço dos petroquímicos (P_i) 26

III.2.4 – Estimativa do preço de queima (H_i) 28

III.2.5 – Estimativa da restrição de capacidade (B_j) 31

III.2.6 – Estimativa dos custos de processo (C_j) 35

III.2.7 – Coeficientes técnicos de processo (a_{ij}) 38

III.3 – Otimização da estrutura da indústria petroquímica 39

III.4 – Viabilizando o problema 40

CAPÍTULO IV – RESULTADOS 44

IV.1 – Solução do problema original com flexibilização das restrições de demanda 44

IV.2 – Análise de sensibilidade da indústria petroquímica (com flexibilização das restrições de demanda) 49

IV.3 – Solução do problema original com flexibilização das restrições de fornecimento 55

IV.4 – Análise de sensibilidade da indústria petroquímica (com flexibilização das restrições de fornecimento) 61

CAPÍTULO V – CONCLUSÕES 66

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 70

APÊNDICE A – COEFICIENTES TÉCNICOS UTILIZADOS NA MODELAGEM 74

APÊNDICE B – CÓDIGO GAMS PARA A PROGRAMAÇÃO LINEAR 85

LISTA DE FIGURAS

Figura I.1 – Estrutura da indústria petroquímica brasileira. 2

Figura I.2 – Estrutura simplificada do setor petroquímico. 4

Figura II.1– Estrutura da rede petroquímica. 7

Figura II.2 – Problema genérico de programação linear. 9

Figura III.1 – Problema de otimização estudado. 20

Figura III.2 – Estrutura genérica do estudo de caso. 21

Figura III.3 – Reações de formação das etanolaminas. 32

Figura III.4 – Reação de formação do DBP. 32

Figura III.5 – Técnica para remoção das inviabilidades implementada no GAMS. 42

LISTA DE TABELAS

Tabela III.1 – Produtos que compõem a superestrutura da rede petroquímica brasileira. 22

Tabela III.2 – Demanda dos produtos da indústria petroquímica brasileira. 23

Tabela III.3 – Limites de fornecimento aos produtos da indústria petroquímica brasileira. 25

Tabela III.4 – Preço de venda (P_i) dos petroquímicos da indústria nacional. 27

Tabela III.5 – Entalpia de combustão dos petroquímicos da indústria nacional. 29

Tabela III.6 – Preço de queima (H_i) dos petroquímicos da indústria nacional. 30

Tabela III.7 – Restrição de limite de produção dos processos (B_j). 33

Tabela III.8 – Custo de produção dos processos da indústria petroquímica (C_j). 36

Tabela IV.1 – Resultados das variáveis F_i e Q_i. 44

Tabela IV.2 – Resultados de quantidade produzida pelos processos *j* (X_j) na rede petroquímica. 46

Tabela IV.3 – Comparativo entre os custos anuais com a variação no preço da energia elétrica. 50

Tabela IV.4 – Comparativo entre os custos anuais com a variação no preço das principais matérias-primas. 51

Tabela IV.5 – Variáveis e parâmetros alterados a partir de cortes no fornecimento da nafta. 52

Tabela IV.6 – Alterações nos processos de produção a partir de cortes no fornecimento da nafta. 52

Tabela IV.7 – Variáveis e parâmetros alterados a partir de cortes no fornecimento de gás natural. 53

Tabela IV.8 – Alterações nos processos de produção a partir de cortes no fornecimento de gás natural. 54

Tabela IV.9 – Resultados das variáveis F_i e Q_i - Alterações no fornecimento. 56

Tabela IV.10 – Resultados de quantidade produzida pelos processos j (X_j) na rede petroquímica - Alterações no fornecimento. 57

Tabela IV.11 – Comparativo entre os custos anuais com a variação no preço da energia elétrica - Alterações no fornecimento. 60

Tabela IV.12 – Comparativo entre os custos anuais com a variação no preço das principais matérias-primas - Alterações no fornecimento. 61

Tabela IV.13 – Variáveis e parâmetros alterados a partir de cortes no fornecimento da nafta - Alterações no fornecimento. 62

Tabela IV.14 – Alterações nos processos de produção a partir de cortes no fornecimento da nafta - Alterações no fornecimento 63

Tabela IV.15 – Variáveis e parâmetros alterados a partir de cortes no fornecimento de gás natural - Alterações no fornecimento 63

Tabela IV.16 – Alterações nos processos de produção a partir de cortes no fornecimento de gás natural - Alterações no fornecimento 64

Tabela A.1 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 1-6. 74

Tabela A.2 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 2-6. 75

Tabela A.3 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 3-6. 77

Tabela A.4 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 4-6. 79

Tabela A.5 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 5-6. 81

Tabela A.6 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 6-6. 82

LISTA DE SÍMBOLOS

a_{ij} – Coeficiente técnico que converte a produção do produto principal produzido pelo processo *j* na produção de um subproduto *i* ou no consumo de um reagente *i*. Quando a_{ij} se refere a um subproduto, seu valor é > 0, por outro lado, quando *i* é um reagente, a_{ij} é < 0. Se *i* é o produto principal do processo *j*, o coeficiente a_{ij} é igual a 1.

B_j – Capacidade instalada de produção de um processo *j* (t/ano).

C_j – Custo de produção de um processo *j* (R$/t).

D_i – Demanda por um produto petroquímico *i* (t/ano).

F_i – Fornecimento de um produto petroquímico *i*. Representa a quantidade do petroquímico *i* que entra na rede petroquímica (t/ano).

H_i – Preço de queima de um petroquímico *i*. Representa o quanto se ganha com a combustão do produto *i* visando a geração de energia (R$/t)

I_j – Custo fixo de uma planta produtora de um petroquímico por um processo *j* (R$/ano).

L_j – Custo com a mão-de-obra requerida por um processo *j* (R$/ano).

M_j – Custo com aditivos e catalisadores em um processo *j* (R$/ano).

P_i – Preço de um produto petroquímico *i* (R$/t).

Q_i – Quantidade produzida de um produto petroquímico *i*. Representa a quantidade de um produto *i* que deixa a rede petroquímico para o mercado interno do país (t/ano).

S_i – Limite de fornecimento de um petroquímico *i* para a rede petroquímica (t/ano).

U_j – Custo com utilidades em um processo de produção *j* (R$/ano).

X_j – Produção do produto principal de um processo de produção *j* (t/ano).

CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO

Antes de analisar o setor petroquímico brasileiro, é necessário citar a indústria química, na qual este setor se insere. A importância da indústria química é considerada estratégica, pois seus produtos estão presentes em diversas outras indústrias, como matérias-primas ou intermediários, ou seja, é possível considerá-la a base da indústria de um modo geral. Segundo o Anuário da Indústria Química Brasileira (ABIQUIM, 2014), o faturamento em 2013 atingiu a marca de US$ 156,2 bilhões, com participação no PIB de 2,6%.

Nos últimos anos, observa-se um crescimento econômico brasileiro acompanhado pelo aumento da demanda dos produtos químicos. Contudo, o cresimento do setor não tem acompanhado a tendência da demanda crescente pelos químicos. O déficit da balança comercial de produtos químicos atingiu a marca de US$ 26,51 bilhões em 2011 (ABIQUIM, 2012), passando para US$ 32 bilhões em 2013 (ABIQUIM, 2014) e tende a crescer cada vez mais.

Como parte da indústria química, a petroquímica também carece de novos investimentos para atender à crescente demanda interna. Além disso, o Brasil apresenta grande déficit tecnológico no parque de refino brasileiro, justificando a necessidade de novos investimentos. Os investimentos neste setor, além de apresentarem tempo de retorno elevado, são de grande porte, dificultando a presença de investidores em tempos de recessão econômica, bem como a tomada de decisão por parte dos investidores.

Outra dificuldade consiste na complexidade de se realizarem estudos para agilizar a tomada de decisão. Isto porque, além do grande número de simulações para diferentes cenários considerando variações em preços e condições de oferta e demanda, a indisponibilidade dos dados necessários para os estudos é o maior empecilho para realização de novas pesquisas.

Segundo a ABIQUIM (Associação Brasileira da Indústria Química), a indústria petroquímica brasileira é concentrada e baseada na importação de diversos produtos, sobretudo da nafta, a principal matéria-prima deste setor. A Figura I.1 apresenta um esquema das empresas que compõem este segmento da indústria brasileira, bem como dos principais produtos.

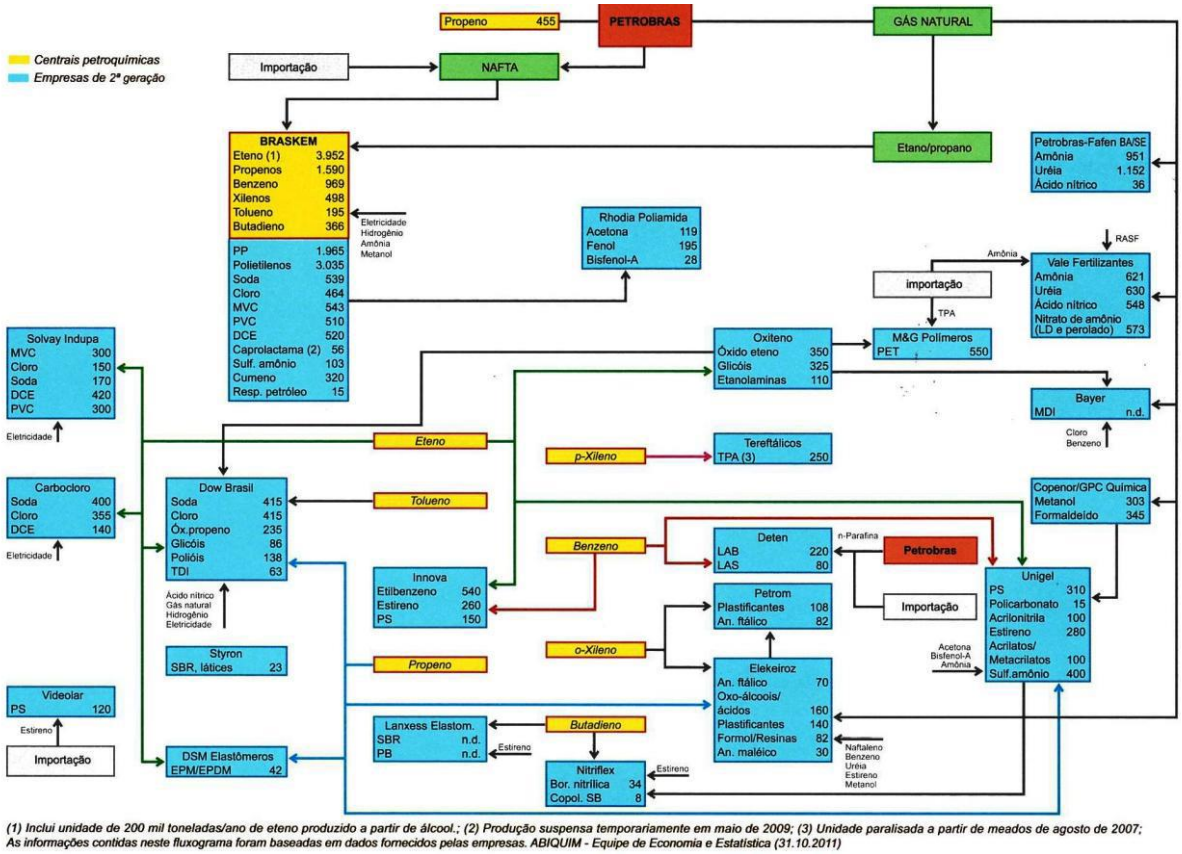

Figura I.1 – Estrutura da indústria petroquímica brasileira. Fonte: ABIQUIM (2012).

As reservas do pré-sal podem representar uma virada na história da petroquímica nacional, visto que segundo relatório do BNDES, estas reservas podem tornar o Brasil superavitário até 2030 (BAIN & COMPANY, 2014). Parte destes recursos serão direcionados ao setor petroquímico, por isso, além de investimentos, este segmento da indústria carece de estudos que facilitem o planejamento e a tomada de decisões estratégicas. Diante das frequentes variações econômicas inerentes ao setor de óleo e gás e a dificuldade de previsão dos cenários futuros, um modelo matemático da indústria petroquímica do Brasil pode tornar o planejamento de investimentos cada vez mais ágil e eficiente.

Contudo, num momento em que o preço do petróleo apresenta grande instabilidade e os Estados Unidos intensificam o refino do gás de folhelho (*shale gas*), apresentando um preço mais competitivo nos produtos finais e até mesmo nos intermediários e matérias-primas, tornar-se um grande exportador pode não ser vantagem. Nesse contexto, o cenário brasileiro é propício à reestruturação do setor petroquímico com maior utilização do gás natural na cadeia petroquímica.

A expectativa pela conclusão das construções de novas refinarias e da produção em larga escala dos poços do pré-sal, dentre as novas refinarias, o complexo petroquímico denominado COMPERJ (Complexo Petroquímico do Rio de Janeiro), torna o setor petroquímico o cenário ideal para estudos e pesquisas científicas nos setores de óleo e gás e petroquímico, principalmente pela possibilidade de inclusão de novas rotas tecnológicas, possibilitando novas configurações ao setor petroquímico. A partir destas expectativas, diversos estudos ressaltaram a importância da integração desta indústria com a de óleo e gás (mais especificamente o segmento de refino), sempre destacando o déficit presente na produção dos petroquímicos básicos e a previsão de crescimento da demanda por estes produtos. Porém, poucos estudos apresentaram um método de auxílio à tomada de decisões no setor (LOUÇÃO JR., 2015).

Conforme discutido, o elevado déficit tecnológico referente ao sucateamento do parque de refino brasileiro, embora este esteja em reestruturação, mostra a necessidade de investimentos no setor. Em virtude desta necessidade, metodologias de planejamento podem ser de grande valia na tomada de decisões, principalmente para não perder recursos financeiros alocando-os de maneira indevida.

Na literatura, trabalhos como o de Alves *et al.* (2005) apresentam a necessidade de um planejamento adequado para a indústria petroquímica brasileira. Ao se avaliarem as competências para inovação na indústria petroquímica do Brasil, foi observado que o grande problema deste setor não é a falta de recursos humanos qualificados (ALVES *et al.*, 2005). Além disto, o nível técnico foi bem classificado, embora haja dependência por alguns petroquímicos e tecnologias estrangeiras. A grande barreira à modernização e capacidade inovadora da petroquímica nacional está nas competências organizacionais deste setor, ou seja, na falta de planejamento estratégico (ALVES *et al.*, 2005). Em outra abordagem, Loução Jr. (2015) apresentou a primeira tentativa de modelagem matemática da indústria petroquímica nacional, considerando a indústria petroquímica como um bloco único, uma rede completamente integrada, conforme mostra a Figura I.2.

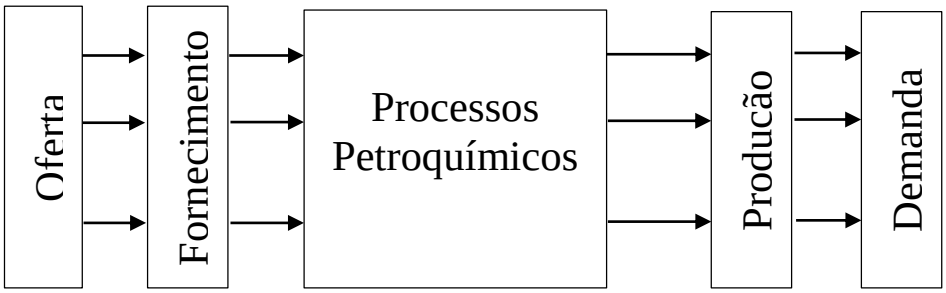

Figura I.2 – Estrutura simplificada do setor petroquímico.

Deste modo, um modelo matemático que represente a indústria petroquímica do Brasil como um sistema interligado de produtos e matérias-primas, consumidos e gerados a partir de diferentes processos químicos permite o planejamento a médio e longo prazo de maneira mais ágil e eficiente. Estes estudos de caso podem auxiliar na tomada de decisões sobre o que fazer com os recursos financeiros e/ou naturais, recursos estes provenientes, por exemplo, de um aumento na quantidade de uma determinada matéria-prima, da variação do preço da energia ou de um produto básico para o setor petroquímico.

O trabalho tem como objetivo principal analisar as estruturas ótimas para a indústria petroquímica brasileira em diferentes cenários. As análises acerca do setor são realizadas a partir da minimização do custo anual do setor petroquímico. Estudos de caso representando excesso ou escassez de matérias-primas, aumento no preço de determinados produtos e variações no preço da energia elétrica podem modificar a estrutura do setor e fazem parte das análises deste trabalho.

Os objetivos específicos consistem, primeiramente, na solução do problema original formulado através de uma técnica de otimização disponível para o método simplex do *software* utilizado. Após tornar o modelo proposto viável, foram realizados alguns estudos de caso para avaliar se o corte que delimitou o setor petroquímico no Brasil foi bem realizado e os impactos que algumas variações de parâmetros podem trazer na rede petroquímica e nos custos do setor. Os estudos incluem a avaliação deste setor em relação às duas principais matérias-primas, nafta e gás natural, respectivamente. Além disso, diante do elevado gasto com energia elétrica industrial, é interessante analisar a participação deste parâmetro nas despesas finais da indústria petroquímica.

CAPÍTULO II – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, além de se apresentarem os modelos propostos por Rudd *et al.* (1981) no livro Petrochemical Technology Assessment, será feita uma revisão dos principais trabalhos realizados a partir desses, bem como de suas principais conclusões. Diante da linearidade dos modelos, uma breve revisão sobre programação linear com foco maior no método simplex será apresentada.

II.1 – Modelos tradicionais

Os modelos sugeridos por Rudd *et al.* (1981) foram baseados na forte indústria petroquímica dos Estados Unidos entre o final da década de 70 e início da década de 80. Os procedimentos para se encontrar a melhor estrutura baseiam-se na minimização do custo de produção da indústria petroquímica, ou seja, do custo total para funcionamento da rede petroquímica avaliada.

Para construção destes modelos, foram considerados 182 processos de transformação (representados pelo índice j) envolvendo 131 produtos petroquímicos, intermediários e matérias-primas (representados pelo índice i). A modelagem ainda envolve a aplicação de restrições de fornecimento de petroquímicos (S_i), de capacidade instalada dos processos (B_j), da demanda pela quantidade de produto ou intermediário produzido (D_i) e de balanço de massa.

O primeiro modelo para representar o custo da indústria petroquímica é descrito pela Equação II.1 (RUDD *et al.*, 1981):

$$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j X_j + \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(P_i - H_i) \qquad \text{(II.1)}$$

Analisando a equação quanto às variáveis e aos parâmetros que compõem o modelo, onde P_i é o preço de compra do produto i, enquanto H_i é o *heating value* ou preço de queima, ou seja, representa o preço da energia obtida através da combustão do produto i. O parâmetro C_j representa o custo unitário de produção do processo j. Este é composto pela soma de outros quatro termos: o custo fixo I_j, o custo da mão-de-obra L_j, o custo com catalisadores e aditivos

M_j e o custo com utilidades U_j. A variável X_j representa a quantidade de produto principal produzida pelo processo *j*. É importante ressaltar que, caso um subproduto de um processo *j* não faça parte da rede, ele entra como crédito no custo com aditivos e catalisadores, como um abatimento. Por último, a variável F_i que representa a quantidade de produto *i* que vem de fora da rede petroquímica analisada. A análise da estrutura da rede petroquímica baseia-se, neste caso, na minimização desta função custo (função objetivo deste problema de otimização).

Com relação às três parcelas da função objetivo, a primeira representa o custo de compra de produtos vindos de fora da superestrutura analisada; a segunda representa o custo de produção total pelo processo *j*, já que é composta pelo produto do preço unitário (por tonelada) pela quantidade produzida, em toneladas por ano. O último somatório do modelo representa um termo definido como uma correção ao excesso, ou seja, resumidamente, representa o quanto se deixa de ganhar com a venda daquele excedente produzido (também denominado custo de oportunidade). Note que este termo se anula quando $Q_i = D_i$, ou seja, quando apenas o demandado é produzido, não há correção.

O segundo modelo para o custo considera uma situação ideal, que limita o crescimento da indústria petroquímica, já que todo o excesso se transforma em um abatimento energético. mas que pode ser aplicada a países em desenvolvimento, já que os intermediários e subprodutos são utilizados dentro da indústria por não apresentar alto valor agregado no mercado. A Equação II.2 utiliza as mesmas terminologias do modelo anterior (RUDD *et al.*, 1981).

$$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j^* X_j - \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(H_i) \qquad \text{(II.2)}$$

Em comparação com o primeiro modelo, notam-se as diferenças com relação ao parâmetro C_j* e ao último termo da função objetivo, que não considera mais a variável P_i. Ou seja, o termo não mais se refere ao custo de oportunidade, o quanto se deixa de ganhar com a venda dos produtos excedentes, e representa um abatimento no custo anual devido à geração de energia pela queima do execedente produzido. O parâmetro C_j* não inclui créditos com subprodutos: o único abatimento no custo total da indústria petroquímica se refere aos créditos de energia pela queima do excesso de produto. Este modelo é capaz de mostrar uma interessante visão dos limites de performance considerando a indústria petroquímica completamente integrada.

A Figura II.1 apresenta um esquema da modelagem proposta por Rudd *et al.* (1981) conforme discutido nesta seção. Um ponto comum aos dois modelos para o custo é a necessidade de uma restrição de balanço de massa. Ou seja, se uma certa quantidade de matéria-prima entra no modelo, é necessário que haja uma equação que represente sua transformação em produto. Os parâmetros a_{ij} representam os coeficientes técnicos do petroquímico *i* no processo *j*, sendo este valor negativo para reagentes (indicando o consumo) e positivo para produtos (indicando a formação). Logo, representam matematicamente a transformação química de cada composto.

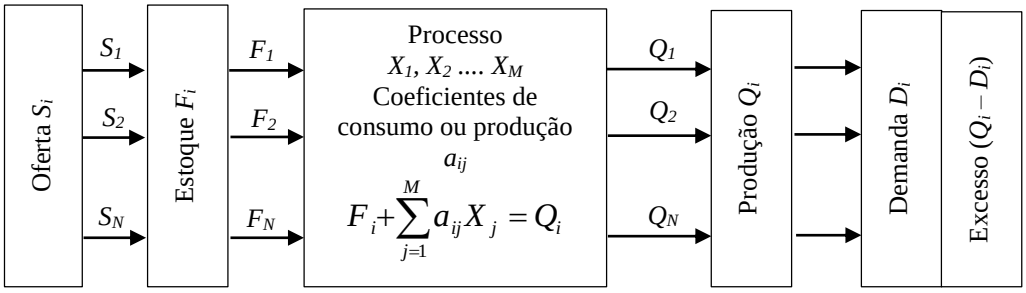

Figura II.1 – Estrutura da rede petroquímica
Fonte: Adaptada de Rudd *et al.* (1981).

Analisando a restrição de balanço de massa, apresentada na Figura II.1, tem-se: A quantidade de produto *i* produzida (Q_i) é igual à quantidade que entra na rede (F_i), mais o que é gerado pelo processo *j*, $a_{ij} > 0$, subtraído da quantidade de *i* consumida no processo *j*, quando $a_{ij} < 0$.

A minimização da função custo para diferentes cenários da indústria petroquímica foi utilizada para exemplificar as possíveis conclusões que podem ser feitas a partir destes modelos de suporte ao planejamento (RUDD *et al.*, 1981). Os autores se basearam nos dados de capacidade de produção de 1977 e em algumas estimativas sobre o cenário do mercado nos anos seguintes para avaliar possíveis investimentos na indústria petroquímica até 1985.

Para esta análise, foram considerados diferentes cenários com diferentes fatores de utilização da capacidade de produção, tomando como base o ano de 1977. Os fatores utilizados foram 100%, 50% e 0%. Quando o fator é 100%, as possibilidades de expansão são as menores possíveis, já que as unidades já trabalham em capacidade máxima. Em 50%, existe uma

possibilidade de substituição de metade da capacidade de produção por novas alternativas. Quando o fator de utilização é 0%, há uma situação ideal, pois toda a capacidade de produção pode ser substituída, ou seja, novas rotas tecnológicas podem aparecer na superestrutura ótima, caso sejam uma alternativa à minimização dos custos ou maximização dos lucros da indústria petroquímica. A avaliação destes diferentes cenários permite que se entendam as ineficiências da estrutura atual do setor, identificando possíveis correções. Por exemplo, Rudd *et al.* (1981) constataram que ao eliminar as restrições de capacidade de produção, o ácido acético se torna a única matéria-prima para produção de anidrido acético. Além disto, ocorre uma redução de 6% na produção de etileno.

A entrada de novas tecnologias também foi avaliada pelos autores. Os cenários com 100%, 50% e 0% do fator de utilização da capacidade de produção, considerando o ano base 1977, foram novamente simulados, de modo que as novas rotas tecnológicas de produção introduzidas no modelo são consideradas como opções.

Rudd *et al.* (1981) ainda avaliaram a sensibilidade do modelo, ou seja, o modelo matemático foi submetido a variações nos parâmetros como o preço da energia e a oferta de determinadas matérias-primas, neste caso identificando a qual matéria-prima/insumo a indústria estudada é mais sensível.

Tais estudos exemplificam como os modelos propostos auxiliam o planejamento a médio e longo prazo. Diante da importância e sensibilidade dos parâmetros envolvidos nos modelos, quanto maior a confiabilidade dos dados de preços, demandas, entre outros parâmetros, melhores são as respostas no que diz respeito a tomadas de decisões e análise de investimentos no setor. A dificuldade da obtenção de dados da indústria petroquímica representa um motivo para a baixa quantidade de trabalhos encontrados sobre tais metodologias de planejamento.

II.2 – Programação Linear - Simplex

Problemas de programação linear (PL) são problemas de otimização nos quais tanto a função objetivo quanto as restrições são lineares (HIMMELBLAU e EDGAR, 1988). A programação linear é uma importante área da otimização, já que muitos problemas práticos em pesquisa operacional são lineares. Além disso, diversos conceitos centrais da otimização foram

inspirados na PL, como por exemplo, dualidade, decomposição, e a importância da convexidade e suas generalizações.

A Figura II.2 representa um problema genérico de programação linear. As variáveis x_n são as variáveis de decisão, os termos a_{mn} representam os coeficientes das variáveis e os símbolos b_m representam os termos independentes.

$$\text{Max (ou min) } Z = c_1x_1 + c_2x_2 + c_3x_3 \ldots + c_nx_n \text{ \} função objetivo}$$

$$\text{Sujeito a: } \left.\begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \ldots + a_{3n}x_n = b_3 \\ \ldots \quad \ldots \quad \ldots \quad \ldots \quad \ldots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + a_{m3}x_3 + \ldots + a_{mn}x_n = b_m \end{array}\right\} \text{Restrições}$$

$$x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0,\ x_3 \geq 0,\ \ldots,\ x_n \geq 0 \text{ \} condição de não-negatividade}$$

Figura II.2 – Problema genérico de programação linear.
Fonte: Passos (2008).

Embora os problemas tradicionais de *network flow* e de *multicommodity flow*, problemas de logística relacionado ao transporte de produtos, tenham sido de grande importância no desenvolvimento de algoritmos para resolução dos problemas de programação linear, é importante ressaltar que existem muitos algoritmos voltados à resolução de outros problemas de otimização que também são capazes de resolver problemas lineares, dada a simplicidade da PL.

Após o final da segunda guerra, a programação linear ganhou destaque com a criação do método Simplex. O Simplex foi desenvolvido por George Dantzig através do projeto SCOOP (*Scientific Computation of Optimum Programs*). Inicialmente, a solução pelo método Simplex era manual, porém, com a intensificação do uso de computadores, o método teve seu uso expandido para problemas maiores (PASSOS, 2008).

O Método Simplex é uma técnica utilizada para se determinar, numericamente, a solução ótima de um modelo de Programação Linear. A partir de uma estimativa inicial (x_0), outras soluções básicas viáveis são localizadas acarretando melhores valores para a função objetivo até que a solução ótima seja obtida.

O algoritmo deste método descreve uma sequência de passos para a solução dos sistemas lineares sujeitos à função objetivo. Trata-se de um método iterativo para maximizar ou minimizar uma função objetivo de um modelo matemático linear, considerando algumas restrições lineares. A cada iteração realizada, a solução obtida é mais próxima da ótima, ou seja, as soluções passam de um ponto extremo da região de soluções a outro, até que se atinja a ótima. As iterações terminam no momento em que, estando em um ponto extremo, todos os pontos extremos adjacentes a ele fornecem valores menores (em problemas de maximização) ou maiores (em problemas de minimização) para a função objetivo (SILVA, 2012).

Para Aurich (2004), o simplex é uma técnica baseada no avanço de um vértice a outro adjacente da região de busca definida pelas restrições do problemas procurando otimizar, maximizar ou minimizar, a função objetivo.

O método simplex está baseado em uma solução básica viável inicial, a qual é um ponto extremo (vértice) da região de busca. Após verificar se a estimativa inicial é o ótimo, há uma mudança de vértice na direção que torne a função objetivo menor e verifica se este novo vértice é ótimo. O processo termina quando estando num ponto extremo, todos os outros pontos extremos adjacentes fornecem valores maiores para a função objetivo, no caso de problemas de minimização.

Portanto, a troca de vértice faz uma variável não básica (variáveis que não compõem a solução básica) crescer ao mesmo tempo em que zera uma variável básica (variáveis que compõem a solução básica) conservando a viabilidade dos problemas de programação linear (PASSOS, 2008). Para tal, o ideal é escolher uma variável cujo custo relativo é mais negativo para entrar na base, tal que as trocas de vértices sejam feitas até que não exista mais nenhum custo relativo negativo. A variável que sairá da base é aquela que, ao se anular, garante que as demais continuem maiores ou iguais a zero, quando aumentado o valor da variável que entra na base.

Em resumo, o método simplex compreende os seguintes passos:

a) Encontrar uma solução básica inicial;

b) Verificar se a solução é ótima. Se for, o problema está resolvido. Caso contrário, continuar para o passo seguinte;
c) Determinar a variável não básica que deve entrar na base;
d) Determinar a variável básica que deve sair da base;
e) Calcular a nova solução e voltar ao passo descrito no item “b”.

Na literatura é possível encontrar muitos trabalhos sobre a utilização do Simplex em programação linear. Os trabalhos se dividem quanto a utilização de pacotes de *softwares* de otimização. Os mais utilizados são: LINDO, SOLVER, LINGO, VISUAL XPRESS, MATLAB e GAMS, este último o pacote escolhido neste trabalho.

II.3 – Pesquisas relacionadas

Diversos autores aplicaram modelos similares aos de Rudd *et al.* (1981) às indústrias de outros países, baseados em diferentes metodologias e conceitos da otimização. A relevância e aplicabilidade dos modelos propostos por Rudd *et al.* (1981) é observada nas regiões onde pesquisas semelhantes foram realizadas. Os modelos apresentados foram aplicados à avaliação de novos processos de produção e na análise de investimentos no setor a partir de estudos de sensibilidade do mercado, por exemplo.

Stadtherr e Rudd (1976) propuseram uma tentativa incial de modelagem da indústria petroquímica, que mais tarde seria refinada por Rudd *et al.* (1981). A visão da indústria, proposta como um sistema de M transformações químicas e N produtos petroquímicos, resultaria em uma equação matricial pela qual foram feitas previsões razoáveis no que diz respeito ao comportamento do setor petroquímico quanto à variações no fornecimento e na demanda, bem como na utilização de matérias-primas.

Os pesquisadores chegaram à conclusão de que este modelo preliminar seria essencialmente um modelo estático de alocação de recursos. Quando se consideram projeções de desenvolvimento do setor, este modelo poderia ser utilizado para se obter alguma percepção sobre o seu futuro. Resumidamente, pode-se dizer que este modelo foi apenas um precursor de um modelo mais amplo com a capacidade de prever bem as flutuações deste setor tão dinâmico da indústria.

Os estudos de Mikkelsen e Rudd (1981) para o desenvolvimento da indústria petroquímica da Noruega foram realizados num cenário parecido com o atual brasileiro. A descoberta de uma importante reserva no Mar do Norte impulsionou a petroquímica do setor local, daí a importância dos estudos para direcionar da melhor forma como utilizar estes recursos naturais. Estes campos foram de grande importância no desenvolvimento da estatal norueguesa Statoil.

O modelo contemplou toda a indústria petroquímica europeia de modo a definir quão impactante seria esta nova reserva na participação da Noruega na indústria petroquímica europeia. Dos 23 produtos que se mostraram interessantes economicamente a partir da simulação, 13 já estavam sendo produzidos.

Como resultados, a simulação não identificou uma alavancagem econômica da petroquímica norueguesa, ou seja, as reservas do Mar do Norte não representavam uma oportunidade de crescimento do setor petroquímico norueguês. Logo, foi predito pelo modelo que os recursos provenientes do Mar do Norte deveriam ser comercializados como matéria-prima pelo setor de óleo e gás sem qualquer integração com a indústria petroquímica (MIKKELSEN e RUDD, 1981).

A empresa Ernst & Young publicou um estudo sobre perspectivas para a indústria de óleo e gás no Brasil, mais especificamente sobre as lições aprendidas com as reservas do Mar do Norte. Os dados apresentados no relatório reforçam as conclusões de Mikkelsen e Rudd (1979), pois demonstram que a política da Noruega esteve baseada no fortalecimento da indústria de óleo e gás, mantendo a produção dos campos em um ritmo mais lento de desenvolvimento, de modo a respeitar os tempos nas diferentes fases da exploração e produção. Esse desenvolvimento da produção com passos firmes permitiu ao país desenvolver a sua estrutura logística e de suporte ao setor de óleo e gás (EY, 2009).

Jiménez *et al.* (1982) propuseram um estudo da indústria petroquímica do México mais voltado para uma reestruturação do setor. Desta vez, o modelo a ser utilizado não foi puramente linear devido ao processo de substituição de importações que fazia parte do cenário econômico mexicano na época. Os autores também apresentaram uma abordagem heurística para estudo do nível de utilização das unidades de processo.

Devido às particularidades da indústria petroquímica mexicana à época, os autores escolheram uma abordagem diferente, por programação inteira mista (PIM). Nesta abordagem, o termo não linear se referiu diretamente à substituição de importações e contemplou uma variável binária referente ao início da construção ou não de novas unidades de produção.

A partir deste modelo foi possível prever o percentual da capacidade de produção instalada associado ao menor custo total de produção. Porém, diferentemente do modelo tradicional, o custo também inclui a construção de novas unidades de produção. Outras conclusões importantes obtidas através da comparação da solução ótima com dados do setor foram:

- A não produção do metanol causou uma substituição no processo de produção do benzeno;
- Menor investimento foi requerido na construção de novas plantas;
- O processo de produção do acrilato de etila, produzido a partir do acetileno, utilizou apenas 57% da capacidade de produção;
- O custo mínimo na indústria petroquímica mexicana foi alcançado quando os processos utilizaram 60% de sua capacidade instalada.

O trabalho de Jiménez *et al.* (1982) foi aprimorado em sequência por Jiménez e Rudd (1987). Neste novo trabalho, se introduziu um modelo recursivo de programação linear inteira mista que apresenta o planejamento anual da indústria petroquímica do México para aumento de capacidade de produção e instalação de unidades de processos novas para atendimento de demanda em 10 anos.

Em um momento de reestruturação da indústria petroquímica mexicana, Toledo *et al.* (2010) apresentaram um novo modelo com o objetivo de ajudar na tomada de decisão para escolha das melhores rotas de produção para compor a estrutura petroquímica. No modelo, considerou-se a cadeia desde o refino do petróleo até os produtos petroquímicos finais. A pesquisa mostrou que, à época, o uso do petróleo como matéria-prima na produção de petroquímicos era uma opção economicamente mais atrativa que a exportação do petróleo bruto.

Fathi-Afshar *et al.* (1985) propuseram a adição de uma segunda função objetivo ao modelo tradicional de Rudd. Esta nova função busca uma rede ótima de processos petroquímicos que apresente menor custo e menor toxicidade associada à emissão dos produtos químicos produzidos. Porém, os autores demostraram que o conjunto ótimo de processos químicos com menor custo não corresponde ao conjunto dos processos químicos com menor nível de toxicidade. Ou seja, uma redução da toxicidade acarreta um aumento nos custos e vice-versa.

Alguns outros autores, como Santiago *et al.* (1986) propuseram a aplicação de um modelo não linear para minimizar o custo anual do setor petroquímico sujeito às mesmas restrições de demandas, fornecimento de matérias-primas e balanço de massa. Para utilizar técnicas de programação linear, os autores apresentam uma estratégia de linearização do modelo que permite chegar de maneira mais rápida ao ótimo global, ressaltando a maior vulnerabilidade a pontos inviáveis.

Al-Fadli *et al.* (1988) apresentaram uma formulação alternativa ao modelo tradicional de programação linear, de fluxo em rede, em uma aplicação dos conceitos para o planejamento da indústria petroquímica da Arábia Saudita. Os resultados mostraram que a resolução através do fluxo em rede apresentou a solução ótima em um tempo três vezes menor que a programação linear, indicando que a modelagem apresentada pode ser uma boa alternativa para problemas de programação linear de larga escala.

Gurkan e Kartal (1989) descreveram o desenvolvimento da indústria petroquímica da Turquia. Após várias simulações, obteve-se o panorama associado ao menor custo contendo quais são as matérias-primas da estrutura ótima, bem como os processos, semelhante ao trabalho proposto por Loução Jr. (2015).

O estudo do modelo criado reiterou que a demanda, a capacidade de produção e o preço das matérias-primas são informações importantes para o planejamento da indústria devido à sensibilidade do modelo a estes fatores. Outro resultado importante consiste na capacidade de redução no custo do setor a partir da aplicação de novas tecnologias de produção. No caso da indústria turca, os autores revelaram que esta redução poderia alcançar até 9% (GURKAN e KARTAL, 1989).

Um fator de importância no setor petroquímico é a sensibilidade em relação a variações de preço, demanda e fornecimento. Os autores identificaram para a petroquímica da Turquia que a matéria-prima mais influente no custo total do setor é a nafta. Uma simulação mostrou que se o preço da nafta for dobrado, o custo de produção é aumentado em 25% (GURKAN e KARTAL, 1989).

O modelo gráfico foi outra variante proposta por Chávez *et al.* (1991), cuja finalidade foi obter resultados com maior grau de confiabilidade. Este simulador poderia ser utilizado por setores específicos da indústria química em situações de perturbações externas ou troca de cenários econômicos.

Apesar da simulação ter considerado cada tecnologia individualmente, a aproximação que levou ao ótimo considerou a indústria como um todo. Ou seja, o programa é flexível quanto à utilização de aproximações para permitir uma melhor avaliação da lucratividade individual de cada processo. Em geral, esta simulação é mais adequada para estudos de sensibilidade, até mesmo pela possibilidade de desagregação e avaliação das diferentes tecnologias separadamente. Entretanto, ainda existem muitos estudos que buscam aperfeiçoar esta abordagem e, devido à maior complexidade desta análise, os modelos econômicos lineares ainda são os mais utilizados para estes tipos de estudos.

Al-Sharrah *et al*. desenvolveram, em diversas parcerias com outros pesquisadores, modelos de planejamento a longo prazo para a indústria petroquímica do Kuwait com diferentes funções objetivo. Em Al-Sharrah *et al.* (2001), um modelo de planejamento integrado a uma função objetivo ambiental foi apresentado. O modelo de programação linear inteira mista possuía duas funções objetivo, uma para atender ao balanço de massa de forma a minimizar os custos, sujeito as restrições tradicionais, e outra ligada ao mínimo risco ambiental, baseada em um índice de toxicidade dos produtos petroquímicos.

O modelo original de Al-Sharrah *et al.* (2001) foi modificado nos trabalhos seguintes de modo a incluir novas restrições que permitissem a busca de soluções em novos objetivos. Em Al-Sharrah *et al.* (2002), um critério de seleção estratégica de novas unidades de processamento foi adicionado, objetivando a busca por sustentabilidade e estabilidade econômica por um longo período de tempo às empresas do setor.

Al-Sharrah *et al.* (2003) incluíram modelos para previsão de preços dos petroquímicos a curto e longo prazo. Estes modelos de previsão foram aplicados no planejamento da indústria petroquímica do Kuwait. Segundo os resultados obtidos, a inclusão da previsão dos preços proporcionou uma melhor análise de planejamento a longo prazo, dada a sensibilidade do planejamento deste setor aos dados de entrada, como os preços dos petroquímicos, por exemplo.

Al-Sharrah *et al.* (2006) aprimoraram o modelo apresentado em 2001 para a indústria petroquímica do Kuwait. As melhorias foram voltadas à escolha de rotas para a produção de petroquímicos associados a uma maior lucratividade e menor risco à população local no que diz respeito a acidentes. O estudo foi realizado a partir de uma combinação de resultados obtidos a partir da programação linear inteira mista (PLIM) em busca da solução que apresentasse maior lucratividade e menor risco e utilizando uma ferramenta estratégica de seleção e eliminação dos processos químicos selecionados com os melhores resultados da PLIM.

No trabalho de Al-Qahtani *et al.* (2008), os autores incluíram no modelo determinístico de Al-Sharrah *et al.* (2001), incertezas dos parâmetros de rendimento de processo, custos de matérias-primas, preço dos produtos e limite inferior da demanda. Além da incerteza, os riscos associados às variações do lucro obtido, nos rendimentos de processo e na previsão de demanda futura também foram avaliados. A inclusão da incerteza no modelo gerou 5.341 parâmetros incertos que foram modelados em um número total de 200 cenários para cada parâmetro aleatório. Segundo os autores, este modelo apresenta maior robustez na análise de novas estruturas petroquímicas.

Alguns trabalhos buscavam a diminuição do tempo e esforço computacional na resolução destes modelos. Sahinidis *et al.* (1989) trouxeram a proposta de uma modelagem multiperíodo de programação linear inteira mista (PLIM) para escolha de processos e avaliação do aumento da capacidade de produção da indústria analisada.

O tempo computacional para resolução do modelo foi analisado com base em diferentes metodologias, a saber: enumeração e limitação (*"branch and bound"*), corte inteiro (*"integer cuts"*), plano de corte (*"strong cutting planes"*), decomposição de Benders (*"Benders decomposition"*) e heurística. A partir dos resultados obtidos, as metodologias de cortes inteiros, planos de corte e enumeração e limitação apresentaram os melhores resultados.

Van den Heever e Grossmann (1999) apresentaram dois algoritmos de planejamento em sua pesquisa. Os algoritmos foram apresentados de forma genérica; deste modo, podem ser adaptados a diferentes tipos de problema. As metodologias aplicadas aos algoritmos foram: aproximação externa (*"outer approximation"* - OA) e decomposição em dois níveis (*"bilevel decomposition"*). Suas performances em tempo computacional para resolução dos problemas apresentados foram melhores que o tempo computacional de ferramentas comerciais.

Outro importante trabalho de modelagem matemática voltada ao planejamento estratégico do setor petroquímico é o trabalho de Al-Qahtani e Elkamel (2010). Em seu livro, *Planning and Integration of Refinery and Petrochemical Operations*, os autores apresentam na primeira parte uma introdução ao refino do petróleo e à indústria petroquímica. As classificações-chave da indústria petroquímica, no que diz respeito aos petroquímicos básicos e produtos finais, bem como as possíveis sinergias entre a indústria de óleo e gás e petroquímica também são explicadas.

Na segunda parte do livro, foca-se na explicação e classificação dos modelos disponíveis usados no planejamento sob condições determinísticas, todos ilustrados por uma série de estudos de caso por abordagens diferentes. Esta parte também aborda o projeto e análise da integração refino-petroquímica, através de técnicas de programação linear inteira mista (PLIM). O sistema é modelado como um problema de PLIM e ilustrado através de exemplos numéricos.

Os autores também desenvolvem um quadro para a concepção e análise de possíveis estratégias de integração e coordenação de redes de refinaria e petroquímica de modo a satisfazer as demandas e outras restrições lógicas. A principal característica desta abordagem é o desenvolvimento de uma metodologia para a análise simultânea da integração da rede de processos dentro do sistema refinaria-petroquímica.

As duas primeiras partes servem como base para a terceira e última seção do livro. Nesta seção, os autores abordam o planejamento sob incertezas e consideram o gerenciamento de riscos, utilizando técnicas de programação estocástica. As incertezas dos parâmetros foram inclusas em coeficientes na função objetivo e como parâmetros nas restrições de desigualdade. A robustez do modelo é analisada a partir do uso do método de aproximação da média amostral (*sample average approximation* - SAA). A incerteza dos parâmetros considerados nesta parte

inclui o rendimento do processo, das matérias-primas, os preços e menor demanda de mercado do produto.

O problema de integração introduzido nas primeiras partes é novamente abordado, desta vez, para considerar as diferentes fontes de incertezas nos parâmetros do modelo. A incerteza considerada inclui o preço do petróleo bruto importado, o preço do produto de refinaria, o preço do produto petroquímico, as demandas de mercado da refinaria e da petroquímica. O método de aproximação da média amostral (SAA) está dentro de um esquema iterativo para gerar os cenários necessários e proporcionar a qualidade de solução por medição da folga da solução final (AL-QAHTANI e ELKAMEL, 2010).

Recentemente, a indústria petroquímica brasileira tem sido objeto de estudos, principalmente no que se refere à integração refino-petroquímica, como abordam os trabalhos de Moreira (2008), Pereira (2010) e Gomes (2011). Além disso, a construção do complexo petroquímico COMPERJ, no Rio de Janeiro, tem sido também um grande estímulo às pesquisas nos setores de óleo e gás e petroquímico. Loução Jr. (2015) apresentou uma tentativa de modelagem matemática deste segmento da indústria química.

As principais inovações tecnológicas do processo de Craqueamento Catalítico Fluido foram apresentadas por Moreira (2008). Estas novas tecnologias que influenciam diretamente no rendimento da refinaria e portanto na integração refino-petroquímica, seriam a alternativa ao crescimento da demanda por petroquímicos. Neste trabalho, houve a necessidade de se realizar uma projeção de oferta e demanda dos petroquímicos básicos, reiterando a grande necessidade de investimentos na área, além de uma melhor disposição e organização dos dados deste setor, como informações de preço, demanda, fornecimento das matérias-primas e custos dos processos.

Em Pereira (2010), um levantamento dos processos previstos no projeto inicial do COMPERJ foi realizado mostrando sua evolução. Na expectativa de implantação do FCC petroquímico, permitindo a integração refino-petroquímica no COMPERJ, a importância estratégica deste processo no atendimento das indústrias envolvidas nesta integração, óleo e gás e petroquímica, também foi ressaltada neste trabalho. Enquanto proporciona maior valor agregado às correntes produzidas para a refinaria, para a petroquímica, fornece as matérias-primas que possuem déficit no que diz respeito ao fornecimento dentro do mercado nacional.

Uma análise qualitativa e quantitativa da integração refino-petroquímica sob os aspectos econômicos, mercadológicos, tecnológicos, ambientais e financeiros foi realizada por Gomes (2011). Enquanto a análise qualitativa apresenta um amplo suporte à integração refino-petroquímica, na análise quantitativa, uma comparação entre a rentabilidade de uma refinaria hipotética, que produziria somente combustíveis, e outra integrada à petroquímica, é realizada através de uma simulação e otimização das diferentes configurações de refinarias. Os resultados foram analisados, principalmente, sob o ponto de vista da viabilidade tecnológica (aspectos tecnológicos), rentabilidade (aspectos econômicos), investimentos necessários (aspectos financeiros) e emissões de CO_2 (aspectos ambientais).

A primeira tentativa de modelagem matemática da indústria petroquímica brasileira apresentou alguns problemas quanto à viabilidade do problema de programação linear formulado (LOUÇÃO JR., 2015). O trabalho apresentado mostrou bastante semelhança com o exposto em Rudd *et al.* (1981), uma análise simplificada, embora tenha apresentado inviabilidades, impossibilitando estudos de sensibilidade e a simulação de alguns cenários possíveis no setor petroquímico.

CAPÍTULO III – METODOLOGIA

Neste capítulo, tópicos como a validação dos modelos utilizados por Rudd *et al.* (1981), bem como uma avaliação do *software* (GAMS) serão apresentados. A estimativa dos parâmetros constituintes das equações do modelo, um dos pontos críticos, principalmente devido à indisponibilidade da grande maioria das informações pertinentes, também será discutido neste capítulo.

Devido aos problemas de inviabilidade apresentados na primeira tentativa de modelagem da indústria petroquímica brasileira, também foi feita uma análise da técnica para tornar o modelo disponível no GAMS (*General Algebraic Modeling System*) viável.

III.1 – O problema de otimização

O problema de otimização a ser solucionado é mostrado na Figura III.1.

$$\sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j X_j + \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(P_i - H_i)$$

Restrições:

$$F_i + \sum_{j=1}^{M} a_{ij} X_j = Q_i$$

$$F_i \leq S_i$$

$$X_j \leq B_j$$

$$D_i \leq Q_i$$

$$F_i \geq 0$$

$$X_j \geq 0$$

$$Q_i \geq 0$$

Figura III.1 – Problema de otimização estudado.

O *software* escolhido para o procedimento de otimização foi o GAMS. Além do método padrão para resolução de problemas de programação linear, a escolha pelo GAMS teve também como ponto forte a disponibilidade de técnicas para viabilizar modelos com pontos inviáveis.

O exemplo criado por Loução Jr. (2015), é apresentado a seguir. Para otimização da indústria petroquímica hipotética mostrada na Figura III.2, foi escolhido o primeiro modelo, apresentado na Equação II.1.

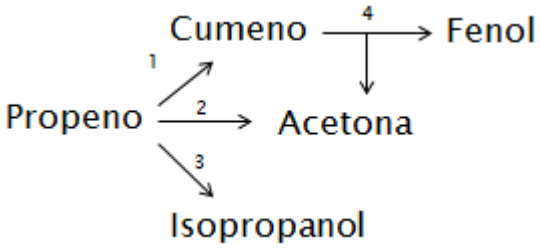

Figura III.2 – Estrutura genérica do estudo de caso.

Na indústria idealizada, o propeno é a única matéria-prima, sendo a base desta indústria petroquímica. Os dados utilizados foram retirados da referência principal (RUDD *et al*., 1981) com base no ano de 1977. São cinco petroquímicos (i = 5) e quatro processos de produção (j = 4).

Conforme apresentado em Loução Jr. (2015), o simples fato do modelo apresentar uma solução viável, mostra que o modelo proposto foi bem formulado (RUDD *et al*., 1981) e pode ser aplicado quando na presença de dados confiáveis. Neste estudo de caso, o custo anual mínimo da indústria foi calculado em US$ 1,1061 x 10^9 por ano, ou seja, para esta indútria hipotética, o custo foi mais de 1 bilhão de dólares, este valor expressivo, dada a dimensão do caso analisado, mostra a importância de um planejamento adequado neste segmento da indústria.

III.2 – Estimativa de parâmetros do modelo

É necessário o levantamento de alguns dados para estimativa dos parâmetros, como a demanda D_i, o fornecimento S_i, os preços P_i, os preços de queima H_i e as capacidades instaladas B_j. Baseado no anuário da Associação Brasileira da Indústria Química (ABIQUIM) de 2012 (ABIQUIM, 2012), um perfil dos produtos que deveriam compor a indústria petroquímica nacional foi traçado em Loução Jr. (2015). Assim, os produtos apresentados na Tabela III.1 foram incluídos como parte deste segmento da indústria química. Os produtos marcados são as matérias-primas da rede petroquímica estando, portanto, sujeitas à anulação dos valores de

demanda D_i, visando a garantir que sejam utilizadas somente para produção dos petroquímicos intermediários e finais (o que indicaria uma superestrutura completamente integrada).

Tabela III.1 – Produtos que compõem a superestrutura da rede petroquímica brasileira.

i	Produtos	i	Produtos
1	1,2-Dicloroetano (DCE)	31	LAB/LAS (Alquilbenzeno Linear)
2	2 Etil-Hexanol	32	Metacrilato de Etila
3	Acetona	33	Metacrilato de Metila
4	Ácido Adípico	34	Metanol
5	Ácido Nítrico	35	m-Xileno
6	Ácido Sulfúrico	36	Nafta
7	Ácido Tereftálico (TPA)	37	n-Butano
8	Acrilonitrila	38	n-Butanol
9	Amônia	39	Nitrato de Amônio
10	Anidrido Ftálico	40	Óxido de Eteno
11	Anidrido Maleico	41	Óxido de Propeno
12	Benzeno	42	o-Xileno
13	Bisfenol A	43	Polibutadieno (PB)
14	Butadieno	44	Policarbonato (PC)
15	Caprolactama	45	Policloreto de Vinila (PVC)
16	Cloreto de Vinila (MVC)	46	Poliestireno (PS)
17	Cloro	47	Polietileno (HDPE e LDPE)
18	Cumeno	48	Polietilenoglicol
19	Diisocianato de Difenilmetano (MDI)	49	Polietilenotereftalato (PET)
20	EPDM (Etileno-Propileno-Dieno Monômero)/EPM (Etileno-Propileno Monômero)	50	Polipropileno (PP)
21	Estireno	51	Polipropilenoglicol
22	Etano	52	Propano
23	Etanolaminas	53	Propeno
24	Eteno	54	Propilenoglicol
25	Etilbenzeno	55	p-Xileno
26	Etilenoglicol	56	SBR (Borracha de Butadieno Estireno)
27	Fenol	57	Soda
28	Formaldeído	58	Sulfato de Amônio
29	Ftalatos	59	Tolueno
30	Gás Natural	60	Uréia

III.2.1 – Estimativa da demanda (D_i)

Diante das dificuldades de se encontrar os dados sobre demanda, não explícitos na literatura e sem referências além do anuário da ABIQUIM (ABIQUIM, 2012), foi proposto um meio para estimar estes dados. Desta forma, concluiu-se que o consumo aparente (CA) pode representar a demanda de maneira inequívoca, já que representa o que foi consumido de determinado produto no país, ou seja, de maneira simplificada: CA = Produção + Importação – Exportação.

A Tabela III.2 apresenta os valores calculados para o consumo aparente de cada produto com base nos valores de importação, exportação e produção contidos no anuário (ABIQUIM, 2012). Porém, como algumas empresas do ramo não declararam a produção, admitiu-se que a demanda é igual a um percentual da capacidade instalada (75-85%) para estimar as produções não declaradas, embora o erro associado a este procedimento seja maior.

Tabela III.2 – Demanda dos produtos da indústria petroquímica brasileira.

i	Produtos	Di (t/ano)	i	Produtos	Di (t/ano)
1	1,2-Dicloroetano (DCE)	400025,60	31	LAB/LAS (Alquilbenzeno Linear)	6514,00
2	2 Etil-Hexanol	100742,70	32	Metacrilato de Etila	29567,90
3	Acetona	112883,80	33	Metacrilato de Metila	22605,90
4	Ácido Adípico	37619,20	34	Metanol	884029,70
5	Ácido Nítrico	491561,30	35	m-Xileno	22020,00
6	Ácido Sulfúrico	7286292,70	36	Nafta	0,00
7	Ácido Tereftálico (TPA)	592457,20	37	n-Butano	0,00
8	Acrilonitrila	23947,90	38	n-Butanol	123202,70
9	Amônia	1671744,80	39	Nitrato de Amônio	1942778,30
10	Anidrido Ftálico	97384,10	40	Óxido de Eteno	261133,83
11	Anidrido Maleico	33430,80	41	Óxido de Propeno	131964,30
12	Benzeno	646049,60	42	o-Xileno	76307,60
13	Bisfenol A	18447,50	43	Polibutadieno (PB)	63642,10
14	Butadieno	256942,60	44	Policarbonato (PC)	47191,20
15	Caprolactama	63626,30	45	Policloreto de Vinila (PVC)	942539,51
16	Cloreto de Vinila (MVC)	700218,60	46	Poliestireno (PS)	373396,20
17	Cloro	1231081,60	47	Polietileno (HDPE e LDPE)	2133090,00
18	Cumeno	160000,00	48	Polietilenoglicol	6500,82

i	Produtos	Di (t/ano)	i	Produtos	Di (t/ano)
19	Diisocianato de Difenilmetano (MDI)	169986,62	49	Polietilenotereftalato (PET)	522174,20
20	EPDM (Etileno-Propileno-Dieno Monômero)/EPM (Etileno-Propileno Monômero)	22029,40	50	Polipropileno (PP)	1391746,70
21	Estireno	633180,40	51	Polipropilenoglicol	6637,10
22	Etano	0,00	52	Propano	0,00
23	Etanolaminas	83702,47	53	Propeno	2042160,90
24	Eteno	3111429,80	54	Propilenoglicol	34615,20
25	Etilbenzeno	540139,80	55	p-Xileno	19597,50
26	Etilenoglicol	445882,09	56	SBR (Borracha de Butadieno Estireno)	61800,70
27	Fenol	97462,40	57	Soda	2505270,80
28	Formaldeído	480697,90	58	Sulfato de Amônio	2327113,90
29	Ftalatos	71785,20	59	Tolueno	0,00
30	Gás Natural	0,00	60	Uréia	4513596,30

III.2.2 – Estimativa do fornecimento (S_i)

Os limites de fonecimento (S_i) representam um importante parâmetro, pois delimitam a quantidade de matéria-prima externa à superestrutura disponível. As estimativas foram baseadas nos dados de produção das matérias-primas da indústria petroquímica nacional. Como a produção (Q_i) é uma variável da modelagem, os dados de produção apresentados pela ABIQUIM podem representar bem a quantidade de matéria-prima disponível no mercado.

A Tabela III.3 apresenta os valores retirados do anuário da ABIQUIM de 2012 (ABIQUIM, 2012). Alguns valores não apresentados (como os dados referentes a propano, etano e gás natural, por exemplo), foram retirados diretamente dos relatórios da principal empresa do setor, a Petrobras (PETROBRAS, 2012; PETROBRAS, 2013). A partir destes relatórios, foi possível completar as informações do anuário para montar a Tabela III.3. É possível notar que alguns valores de S_i são zero, isto foi definido para forçar o modelo a considerar a produção de todos os intermediários petroquímicos garantindo uma integração desde o setor de refino.

Tabela III.3 – Limites de fornecimento aos produtos da indústria petroquímica brasileira.

I	Produtos	Si (t/ano)	I	Produtos	Si (t/ano)
1	1,2-Dicloroetano (DCE)	0,00	31	LAB/LAS (Alquilbenzeno Linear)	0,00
2	2 Etil-Hexanol	0,00	32	Metacrilato de Etila	0,00
3	Acetona	0,00	33	Metacrilato de Metila	0,00
4	Ácido Adípico	0,00	34	Metanol	0,00
5	Ácido Nítrico	0,00	35	m-Xileno	113525,10
6	Ácido Sulfúrico	0,00	36	Nafta	6740000,00
7	Ácido Tereftálico (TPA)	0,00	37	n-Butano	500000,00
8	Acrilonitrila	0,00	38	n-Butanol	0,00
9	Amônia	0,00	39	Nitrato de Amônio	0,00
10	Anidrido Ftálico	0,00	40	Óxido de Eteno	0,00
11	Anidrido Maleico	0,00	41	Óxido de Propeno	0,00
12	Benzeno	0,00	42	o-Xileno	0,00
13	Bisfenol A	0,00	43	Polibutadieno (PB)	0,00
14	Butadieno	0,00	44	Policarbonato (PC)	0,00
15	Caprolactama	0,00	45	Policloreto de Vinila (PVC)	0,00
16	Cloreto de Vinila (MVC)	0,00	46	Poliestireno (PS)	0,00
17	Cloro	0,00	47	Polietileno (HDPE e LDPE)	0,00
18	Cumeno	0,00	48	Polietilenoglicol	0,00
19	Diisocianato de Difenilmetano (MDI)	0,00	49	Polietilenotereftalato (PET)	0,00
20	EPDM (Etileno-Propileno-Dieno Monômero)/EPM (Etileno-Propileno Monômero)	0,00	50	Polipropileno (PP)	0,00
21	Estireno	0,00	51	Polipropilenoglicol	0,00
22	Etano	1790000,00	52	Propano	21000000,00
23	Etanolaminas	0,00	53	Propeno	0,00
24	Eteno	0,00	54	Propilenoglicol	0,00
25	Etilbenzeno	0,00	55	p-Xileno	0,00
26	Etilenoglicol	0,00	56	SBR (Borracha de Butadieno Estireno)	0,00
27	Fenol	0,00	57	Soda	1353071,00
28	Formaldeído	0,00	58	Sulfato de Amônio	0,00
29	Ftalatos	0,00	59	Tolueno	204949,90
30	Gás Natural	13800000,00	60	Uréia	0,00

III.2.3 – Estimativa do preço dos petroquímicos (P_i)

Os parâmetros que representam algum preço ou custo foram os de maior dificuldade para estimar. Diante da indisponibilidade destes valores na literatura e da falta de resposta das empresas produtoras, este parâmetro se tornou um dos maiores problemas durante o levantamento de dados, juntamente com os custo dos processos de produção. Então, após diversas tentativas para a estimação dos preços, decidiu-se utilizar os valores FOB (*Free on Board*) de importação e exportação para estimá-los, ponderando-os pelos volumes de importação e exportação.

Como o valor FOB considera o valor da mercadoria acrescido das despesas com o transporte até o porto de partida da mercadoria, percebe-se que este representa bem o valor de determinado petroquímico em território nacional. Porém, quando trabalhamos com os valores FOB de importação, o valor da mercadoria não considera a chegada no porto de destino, ou seja, não representa o custo do produto em território brasileiro, e sim no território do porto de origem.

Para considerar o valor em território nacional, o valor CIF (*Cost, Insurance and Freight*) que considera os encargos da mercadoria até o porto de destino deve ser utilizado. Logo, se para o cálculo do FOB a responsabilidade do exportador acaba quando a mercadoria entra no navio, para o cálculo do CIF ela só termina quando a carga chega ao seu destino. Porém, como o anuário só apresenta os valores em US$1000 FOB, os encargos com seguro da mercadoria e tarifas internacionais foram desprezados, devido à indisponibilidade de seus valores, aumentando o erro associado a este parâmetro (principalmente para os produtos com maior volume de importação como a nafta, por exemplo).

O preço foi calculado a partir de uma média entre os valores FOB (I_{FOB} e E_{FOB}) e os volumes de importação e exportação (I e E, respectivamente). Conforme a Equação III.1:

$$P = (I_{FOB} + E_{FOB})/(I + E) \qquad \text{(III.1)}$$

O valor final de P é expresso em milhares de dólares por tonelada. Para converter estes valores para moeda brasileira, foi necessário converter os valores para real através da cotação média de 2011 para o dólar, pois os dados do anuário correspondem ao ano de 2011. Segundo

o site da ACINH (Associação, Comercial, Industrial e de Serviços de Novo Hamburgo), a cotação média em 2011 foi R$ 1,67 para cada dólar.

Os valores de P_i já calculados e corrigidos monetariamente a partir dos dados retirados do anuário da ABIQUIM de 2012 são apresentados na Tabela III.4. Outra possibilidade para obter os preços dos produtos seria a correção dos valores apresentados por RUDD *et al.* (1981) com relação à inflação e à moeda. Entretanto, esta opção poderia acarretar erros grosseiros, pois os preços apresentados nesta referência refletem um momento diferente da economia dos Estados Unidos. Esta abordagem estaria comparando a petroquímica americana de 1977 à petroquímica brasileira de 2011, ano base dos dados da ABIQUIM.

Tabela III.4 – Preço de venda (P_i) dos petroquímicos da indústria nacional, estimados através do valor FOB.

i	Produtos	Pi (R$/t)	i	Produtos	Pi (R$/t)
1	1,2-Dicloroetano (DCE)	5656,55	31	LAB/LAS (Alquilbenzeno Linear)	25272,67
2	2 Etil-Hexanol	3339,81	32	Metacrilato de Etila	7570,28
3	Acetona	1759,70	33	Metacrilato de Metila	4285,22
4	Ácido Adípico	3598,22	34	Metanol	614,46
5	Ácido Nítrico	1142,40	35	m-Xileno	1786,83
6	Ácido Sulfúrico	159,95	36	Nafta	1541,15
7	Ácido Tereftálico (TPA)	2223,21	37	n-Butano	835,00
8	Acrilonitrila	3835,36	38	n-Butanol	2464,35
9	Amônia	916,09	39	Nitrato de Amônio	568,14
10	Anidrido Ftálico	2324,04	40	Óxido de Eteno	3198,04
11	Anidrido Maleico	2690,81	41	Óxido de Propeno	3420,70
12	Benzeno	1809,47	42	o-Xileno	1950,72
13	Bisfenol A	3256,72	43	Polibutadieno (PB)	6532,86
14	Butadieno	4484,88	44	Policarbonato (PC)	4587,12
15	Caprolactama	5248,94	45	Policloreto de Vinila (PVC)	2049,59
16	Cloreto de Vinila (MVC)	13041,90	46	Poliestireno (PS)	3370,22
17	Cloro	255,85	47	Polietileno (HDPE e LDPE)	2552,69
18	Cumeno	2100,00	48	Polietilenoglicol	3076,83
19	Diisocianato de Difenilmetano (MDI)	3198,14	49	Polietilenotereftalato (PET)	2922,69

i	Produtos	Pi (R$/t)	i	Produtos	Pi (R$/t)
20	EPDM (Etileno-Propileno-Dieno Monômero)/EPM (Etileno-Propileno Monômero)	5924,20	50	Polipropileno (PP)	2864,72
21	Estireno	2358,00	51	Polipropilenoglicol	5767,76
22	Etano	525,00	52	Propano	600,00
23	Etanolaminas	2575,45	53	Propeno	2318,13
24	Eteno	2137,64	54	Propilenoglicol	2752,52
25	Etilbenzeno	2424,37	55	p-Xileno	2576,95
26	Etilenoglicol	1882,31	56	SBR (Borracha de Butadieno Estireno)	3653,73
27	Fenol	2756,43	57	Soda	567,30
28	Formaldeído	1279,56	58	Sulfato de Amônio	391,76
29	Ftalatos	3708,03	59	Tolueno	1663,82
30	Gás Natural	605,43	60	Uréia	726,03

III.2.4 – Estimativa do preço de queima (H_i)

Assim como o preço de compra, os preços de queima também poderiam ser corrigidos, uma vez que o livro de Rudd *et al.* (1981) apresentava todos estes valores referentes à petroquímica americana de 1975 e 1977. Porém, conforme explicado na seção anterior, os erros associados seriam grosseiros. Assim, a estimativa do preço de queima foi, desta vez, baseada na própria definição deste parâmetro.

Por definição, H_i está relacionada à entalpia de combustão de cada composto petroquímico da estrutura analisada. De posse deste valor em MBTU/kg e do preço da energia no Brasil, consegue-se estimar H_i em R$/t. O preço da energia elétrica no Brasil foi obtido através de reportagem divulgada pelo site G1, 292,70 R$/MWh ou 85,78 R$/MBTU para o ano de 2013. Este valor foi multiplicado pela entalpia de combustão de cada petroquímico, apresentada na Tabela III.5, para gerar os valores de H_i apresentados na Tabela III.6. O ano base foi modificado devido à grande flutuação do preço da energia elétrica no país nos últimos anos. Em 2013 o valor apresentado se aproxima muito da média do valor nos últimos anos, ainda assim, este valor é muito maior se comparado aos valores praticados em outros países.

Tabela III.5 – Entalpia de combustão dos petroquímicos da indústria nacional.

i	Produtos	Entalpia (MBTU/Kg)	i	Produtos	Entalpia (MBTU/Kg)
1	1,2-Dicloroetano (DCE)	0,01096	31	LAB/LAS (Alquilbenzeno Linear)	0,00000
2	2 Etil-Hexanol	0,03876	32	Metacrilato de Etila	0,01782
3	Acetona	0,02947	33	Metacrilato de Metila	0,02222
4	Ácido Adípico	0,01829	34	Metanol	0,02169
5	Ácido Nítrico	0,00000	35	m-Xileno	0,04100
6	Ácido Sulfúrico	0,00000	36	Nafta	0,04556
7	Ácido Tereftálico (TPA)	0,01856	37	n-Butano	0,04731
8	Acrilonitrila	0,01913	38	n-Butanol	0,03451
9	Amônia	0,01596	39	Nitrato de Amônio	0,00000
10	Anidrido Ftálico	0,02120	40	Óxido de Eteno	0,02742
11	Anidrido Maleico	0,01356	41	Óxido de Propeno	0,03193
12	Benzeno	0,04000	42	o-Xileno	0,04111
13	Bisfenol A	0,03062	43	Polibutadieno (PB)	0,00000
14	Butadieno	0,04493	44	Policarbonato (PC)	0,00000
15	Caprolactama	0,02778	45	Policloreto de Vinila (PVC)	0,00000
16	Cloreto de Vinila (MVC)	0,01818	46	Poliestireno (PS)	0,00000
17	Cloro	0,00000	47	Polietileno (HDPE e LDPE)	0,00000
18	Cumeno	0,04151	48	Polietilenoglicol	0,00000
19	Diisocianato de Difenilmetano (MDI)	0,03111	49	Polietilenotereftalato (PET)	0,00000
20	EPDM (Etileno-Propileno-Dieno Monômero)/EPM (Etileno-Propileno Monômero)	0,00000	50	Polipropileno (PP)	0,00000
21	Estireno	0,04022	51	Polipropilenoglicol	0,00000
22	Etano	0,04956	52	Propano	0,04811
23	Etanolaminas	0,00000	53	Propeno	0,04676
24	Eteno	0,04809	54	Propilenoglicol	0,02269
25	Etilbenzeno	0,04111	55	p-Xileno	0,04104
26	Etilenoglicol	0,01818	56	SBR (Borracha de Butadieno Estireno)	0,00000

i	Produtos	Entalpia (MBTU/Kg)	i	Produtos	Entalpia (MBTU/Kg)
27	Fenol	0,03100	57	Soda	0,00000
28	Formaldeído	0,01818	58	Sulfato de Amônio	0,00000
29	Ftalatos	0,00000	59	Tolueno	0,04056
30	Gás Natural	0,11111	60	Uréia	0,01004

Tabela III.6 – Preço de queima (H_i) dos petroquímicos da indústria nacional.

i	Produtos	Hi (R$/t)	i	Produtos	Hi (R$/t)
1	1,2-Dicloroetano (DCE)	939,80	31	LAB/LAS (Alquilbenzeno Linear)	0,00
2	2 Etil-Hexanol	3324,57	32	Metacrilato de Etila	1529,00
3	Acetona	2527,74	33	Metacrilato de Metila	1906,29
4	Ácido Adípico	1568,87	34	Metanol	1860,54
5	Ácido Nítrico	0,00	35	m-Xileno	3517,10
6	Ácido Sulfúrico	0,00	36	Nafta	3907,89
7	Ácido Tereftálico (TPA)	1591,75	37	n-Butano	4058,49
8	Acrilonitrila	1641,31	38	n-Butanol	2960,46
9	Amônia	1368,71	39	Nitrato de Amônio	0,00
10	Anidrido Ftálico	1818,60	40	Óxido de Eteno	2456,75
11	Anidrido Maleico	1162,84	41	Óxido de Propeno	2739,34
12	Benzeno	3431,32	42	o-Xileno	3526,63
13	Bisfenol A	2626,86	43	Polibutadieno (PB)	0,00
14	Butadieno	3854,51	44	Policarbonato (PC)	0,00
15	Caprolactama	2382,86	45	Policloreto de Vinila (PVC)	0,00
16	Cloreto de Vinila (MVC)	1559,34	46	Poliestireno (PS)	0,00
17	Cloro	0,00	47	Polietileno (HDPE e LDPE)	0,00
18	Cumeno	3560,95	48	Polietilenoglicol	0,00
19	Diisocianato de Difenilmetano (MDI)	2668,80	49	Polietilenotereftalato (PET)	0,00
20	EPDM (Etileno-Propileno-Dieno Monômero)/EPM (Etileno-Propileno Monômero)	0,00	50	Polipropileno (PP)	0,00
21	Estireno	3450,38	51	Polipropilenoglicol	0,00

i	Produtos	Hi (R$/t)	i	Produtos	Hi (R$/t)
22	Etano	4251,02	52	Propano	4127,11
23	Etanolaminas	0,00	53	Propeno	4010,83
24	Eteno	4125,21	54	Propilenoglicol	1946,32
25	Etilbenzeno	3526,63	55	p-Xileno	3520,91
26	Etilenoglicol	1559,34	56	SBR (Borracha de Butadieno Estireno)	0,00
27	Fenol	2659,27	57	Soda	0,00
28	Formaldeído	1559,34	58	Sulfato de Amônio	0,00
29	Ftalatos	0,00	59	Tolueno	3478,98
30	Gás Natural	9531,44	60	Uréia	861,64

III.2.5 – Estimativa da restrição de capacidade (B_i)

Mais uma vez a dificuldade de acesso à maioria dos dados necessários aparenta ser uma característica marcante da indústria química brasileira. Ou seja, não é possível ter acesso a todos os processos de produção das empresas do ramo. Para algumas empresas, o sigilo acerca do processo pode representar uma grande vantagem competitiva. Utilizou-se o trabalho de Rudd *et al.* (1981) para saber quais tecnologias caíram em desuso, pois na falta de dados de processo, a base para montar os processos da petroquímica brasileira foi a lista de processos apresentada no livro *Petrochemical Technology Assessment* (RUDD *et al.*, 1981). Contudo, a maioria das novas tecnologias, não foram listadas por Rudd *et al.* (1981) e, portanto, não foram abordadas neste trabalho.

Para seleção dos processos de produção, outro fator relevante foi a presença do reagente principal na lista de processos da indústria brasileira. Se o reagente principal não fazia parte dos produtos listados como parte deste setor, o processo também era eliminado da listagem, assim como os obsoletos. Após criteriosa análise, a listagem final continha 86 processos. Desses, 4 processos foram inclusos com base em dados externos à obra de Rudd *et al.* (1981).

Conforme abordado por Loução Jr. (2015), dois processos foram adicionados aos listados na referência anterior: a produção de nitrato de amônio e a produção de LAB/LAS. Os outros dois se referem à produção das etanolaminas e dos ftalatos, dois grupos de produtos químicos listados na estrutura petroquímica como um único produto, devido à maneira como são abordados pela ABIQUIM. Para facilitar, as reações para a produção de etanolaminas, mostradas na Figura III.3, foram condensadas em uma reação única. Esta considera a reação

entre óxido de eteno e amônia gerando etanolaminas, com excesso de óxido de eteno. Ou seja, representa uma reação hipotética que considera a formação de uma mistura de etanolaminas.

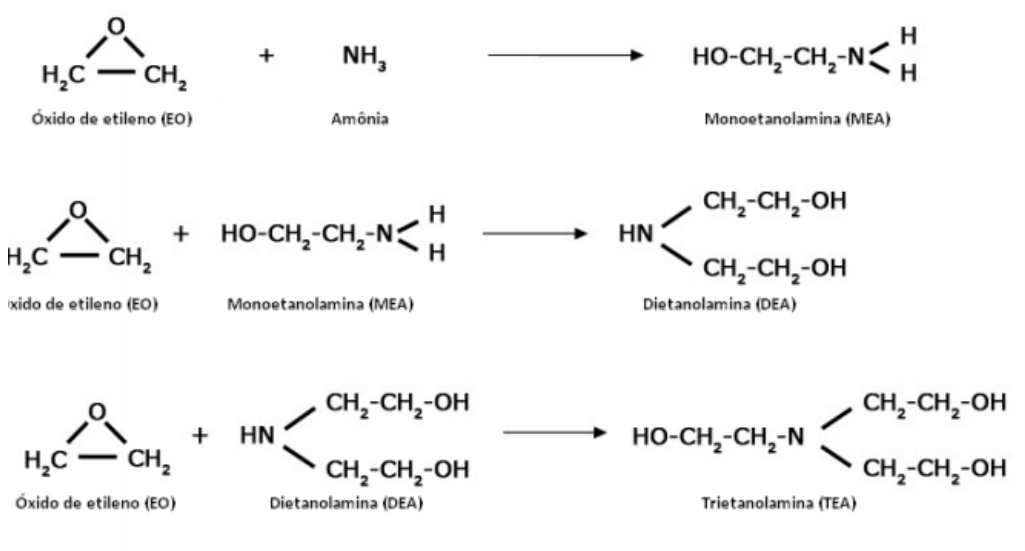

Figura III.3 – Reações de formação das etanolaminas. Fonte: OXITENO (2014).

Diante da indisponibilidade de dados para a classe dos ftalatos, buscou-se no site da Elekeiroz, empresa responsável pela produção de ftalatos no Brasil, as reações de formação, e selecionou-se uma delas para representar estes produtos, conforme a classificação generalista da ABIQUIM. Seguindo o manual completo da Elekeiroz, a reação de formação do dibutil-ftalato (DBP) foi escolhida para representar os ftalatos de maneira genérica (ELEKEIROZ, 2014).

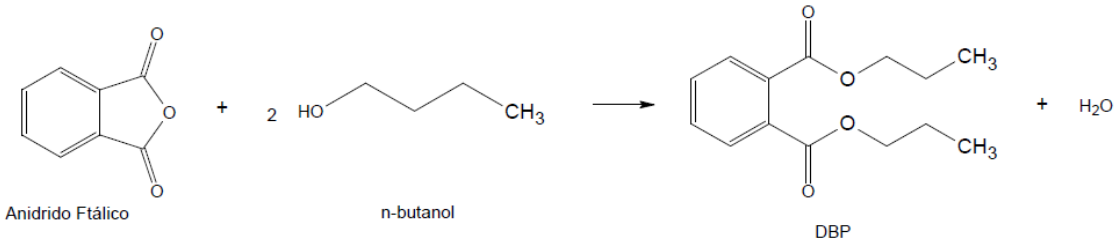

Figura III.4 – Reação de formação do DBP. Fonte: ELEKEIROZ (2014).

Assim, após a delimitação dos processos, as restrições de capacidade instalada (B_j) foram facilmente encontradas no anuário da ABIQUIM (ABIQUIM, 2012). Porém, uma ressalva importante deve ser feita para os produtos com mais de uma rota de produção. Não foi possível saber a parte da capacidade total instalada fornecida pela ABIQUIM correspondente a

cada rota de produção, pois os dados são apresentados por produtos. Assim, a capacidade total fornecida pela ABIQUIM foi utilizada como limite em todas as rotas. Desta forma, existe um erro associado ao processo de seleção das rotas tecnológicas durante a otimização.

Este erro pode suprimir informações de rotas tecnológicas diferentes que são utilizadas na produção de determinados petroquímicos. O resultado gerado pode indicar que um destes processos não é utilizado, pois o limite superior é o limite total de todos os processos citados no anuário. Portanto, a busca pela melhor rota fica quase que totalmente restrita aos custos de processo. A Tabela III.7 mostra os dados de capacidade instalada e limite máximo de produção, bem como a lista dos processos de produção considerados na petroquímica brasileira.

Tabela III.7 – Restrição de limite de produção dos processos (B_j).

Processo de produção	j	Bj (t/ano)	Processo de produção	j	Bj (t/ano)
1,2-Dicloroetano via cloração de eteno	1	1080000,00	Óxido de eteno via oxidação de eteno (oxigênio)	44	500000,00
2 – Etilhexanol via processo OXO	2	150000,00	Óxido de propeno via oxidação de propeno	45	235000,00
Acetona via oxidação do propeno	3	119000,00	Propilenoglicol via hidratação de óxido de propeno	46	86000,00
Ácido adípico via oxidação do ciclohexanol com ácido nítrico	4	87000,00	p - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	47	203000,00
Ácido nítrico, 95%, via amônia	5	661660,00	p - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	48	203000,00
Ácido sulfúrico via processo de absorção dupla	6	8213054,00	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	49	126000,00
Ácido tereftálico, bruto, via p-xileno	7	250000,00	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	50	126000,00
Acrilonitrila via amoxidação do propeno	8	100000,00	Uréia via processo de reciclo total	51	1782000,00
Amônia via reforma do gás natural	9	1588010,00	Uréia via amônia e dióxido de carbono	52	1782000,00
Amônia via reforma de nafta	10	1588010,00	Produção de LAB/LAS	53	10000,00
Anidrido ftálico a partir de o-xileno	11	152000,00	SBR via polimerização por emulsão a frio	54	107700,00
Anidrido maleico via oxidação de benzeno	12	30000,00	SBR via polimerização por solução	55	107700,00

Processo de produção	j	Bj (t/ano)	Processo de produção	j	Bj (t/ano)
Benzeno via desproporcionação do tolueno	13	999076,00	SBR via polimerização por emulsão a quente	56	107700,00
Benzeno via hidrodealquilação do tolueno	14	999076,00	EPDM via polimerização por solução	57	42000,00
Bisfenol A via reação de fenol e acetona	15	28000,00	EPDM via polimerização por suspensão	58	42000,00
Butadieno via desidrogenação do n-butano	16	466000,00	PB via catalisador de cobalto	59	14250,00
Caprolactama via fenol	17	56000,00	PB via catalisador de Ziegler-natta com iodo	60	14250,00
Cumeno via benzeno e propeno	18	320000,00	PB via catalisador de níquel	61	14250,00
Cloreto de vinila a partir de eteno	19	843100,00	PC via fosgenação em solução contínua	62	15000,00
Cloreto de vinila via 1,2-Dicloroetano	20	843100,00	PC via fosgenação interfacial	63	15000,00
Cloro via eletrólise de cloreto de sódio	21	1520949,00	PC via fosgenação em batelada	64	15000,00
Diisocianato de Difenilmetano (MDI) via anilina e fosgênio	22	190000,00	PVC via polimerização em massa	65	728500,00
Estireno via etilbenzeno (desidrogenação)	23	540000,00	PVC via polimerização em suspensão	66	728500,00
Estireno via etilbenzeno (processo hidroperóxido)	24	540000,00	PVC via polimerização em emulsão	67	728500,00
Eteno via craqueamento de etano-propano (50-50 %m)	25	3952000,00	PVC via polimerização em emulsão (em batelada)	68	728500,00
Eteno via craqueamento de nafta (alta severidade)	26	3952000,00	PS via polimerização em massa	69	585500,00
Eteno via pirólise de etano	27	3952000,00	PS via polimerização em suspensão	70	585500,00
Eteno via pirólise de propano	28	3952000,00	PS via polimerização em massa/suspensão	71	585500,00
Etilbenzeno via alquilação do benzeno	29	770000,00	PE HD via tecnologia Union Carbide	72	3035000,00
Etilenoglicol via hidratação de óxido de eteno	30	500000,00	PE HD via tecnologia HOECHST	73	3035000,00
Etilenoglicol via oxidação de eteno	31	500000,00	PE HD via tecnologia Stamicarbon	74	3035000,00
Fenol via oxidação do cumeno	32	196400,00	PE HD via tecnologia Montedison	75	3035000,00
Fenol via sulfonação do benzeno	33	196400,00	PE LD via reação em autoclave	76	3035000,00

Processo de produção	j	Bj (t/ano)	Processo de produção	j	Bj (t/ano)
Formaldeído via oxidação do metanol	34	787600,00	PE LD via reação em autoclave de mistura	77	3035000,00
Metacrilato de metila a partir de acetona	35	100000,00	PE LD em reator tubular	78	3035000,00
Metacrilato de etila a partir de acetona	36	50000,00	Polietilenoglicol a partir de óxido de eteno	79	10000,00
Produção de Etanolaminas	37	142857,14	PET a partir de DMT e etilenoglicol	80	585000,00
Ftalatos a partir de n-butanol	38	266000,00	PET a partir de ácido tereftálico e etilenoglicol	81	585000,00
Nitrato de amônio via ácido nítrico e amônia	39	573002,00	Polipropilenoglicol a partir de óxido de propeno	82	10000,00
Metanol via gás natural (metano)	40	309500,00	PP via processo em fase líquida	83	1965000,00
1-Butanol via propeno utilizando catalisador de cobalto-fosfina	41	150000,00	PP via processo em fase vapor	84	1965000,00
1-Butanol via propeno utilizando catalisador de ródio	42	150000,00	PP via processo em lama	85	1965000,00
Óxido de eteno via oxidação de eteno (ar)	43	500000,00	PP via processo em solução	86	1965000,00

III.2.6 – Estimativa dos custos de processo (C_j)

Os custos referentes aos processos de produção são baseados em quatro parcelas que se referem ao custo fixo I_j, mão-de-obra L_j, custo com catalisadores e aditivos M_j e utilidades U_j. Porém, Rudd *et al.* (1981) calculam este custo sem explicitar estas variáveis. Na verdade, os autores consideram três parcelas no cálculo, a primeira (A), que se refere aos gastos com matérias-primas, catalisadores e aditivos, a segunda (B) aos gastos com utilidades, calculados a partir do preço da energia elétrica (já que os dados são apresentados em toneladas de óleo combustível equivalente), e a terceira (C) aos gastos com mão-de-obra e manutenção da unidade, que representa os gastos com reparos e outras atividades visando o bom funcionamento da planta (RUDD *et al.*, 1981). Estas parcelas englobam os quatro subcustos apresentados: I_j, L_j, M_j e U_j.

Para estimativa dos custos apresentados na Tabela III.17, foi seguida a metodologia baseada em três custos (A, B e C). Para o cálculo do custo A, a metodologia utiliza os

coeficientes a_{ij} e os preços P_i, para calcular o gasto com matérias-primas e o crédito com a produção de subprodutos.

A parcela B foi calculada a partir dos dados fornecidos por Rudd *et al.* (1981) sobre o gasto com utilidades e energia em cada processo, apresentados em FOET (toneladas de óleo combustível equivalentes). Convertendo 1 FOET, que corresponde a 4,54 MWh, admitindo 39% de eficiência na conversão, segundo a World Energy Council, foi possível calcular o custo B a partir do preço da energia elétrica no Brasil (R$ 292,70), conforme apresentado pelo site G1.

Referente aos custos com mão-de-obra e manutenção, o custo C foi calculado com base nos dados de custo unitário de mão-de-obra da ABIQUIM. Como os custos com o pagamento dos funcionários, em geral, são maiores do que os custos com manutenção, devido aos encargos pagos pelas empresas, foi considerado apenas o gasto com mão-de-obra. Além disso, também pelo fato de que os gastos com manutenção são inconstantes, ou seja, nem sempre são gastos programados e certos.

A ABIQUIM sugere que o custo unitário com mão-de-obra esteja em torno de US$ 41,49 por hora (ABIQUIM, 2012). Este valor fornecido contempla todos os gastos da empresa com o funcionário, desde o salário propriamente aos benefícios e auxílios e encargos fiscais.

Ainda é necessário multiplicar este valor pelo número de funcionários e dividir pela quantidade produzida do produto principal (dado fornecido pela ABIQUIM) obtendo o custo C em R$/t. O número de funcionários foi estimado através de comparação entre a produção e a capacidade instalada dos produtos e com base nos dados sobre a complexidade dos processos de produção (RUDD *et al.*, 1981). A Tabela III.8 apresenta os valores dos custos dos procesos (C_j).

Tabela III.8 – Custo de produção dos processos da indústria petroquímica (C_j).

Processo de produção	j	Cj (R$/t)	Processo de produção	j	Cj (R$/t)
1,2-Dicloroetano via cloração de eteno	1	2437,29	Óxido de eteno via oxidação de eteno (oxigênio)	44	5683,89
2 – Etilhexanol via processo OXO	2	5784,47	Óxido de propeno via oxidação de propeno	45	3642,19

Processo de produção	j	Cj (R$/t)	Processo de produção	j	Cj (R$/t)
Acetona via oxidação do propeno	3	4010,23	Propilenoglicol via hidratação de óxido de propeno	46	4609,50
Ácido adípico via oxidação do ciclohexanol com ácido nítrico	4	4736,79	p - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	47	4766,16
Ácido nítrico, 95%, via amônia	5	2143,33	p - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	48	3798,79
Ácido sulfúrico via processo de absorção dupla	6	654,29	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	49	3436,76
Ácido tereftálico, bruto, via p-xileno	7	9297,64	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	50	3407,79
Acrilonitrila via amoxidação do propeno	8	5169,93	Uréia via processo de reciclo total	51	2271,97
Amônia via reforma do gás natural	9	2998,59	Uréia via amônia e dióxido de carbono	52	1984,22
Amônia via reforma de nafta	10	3181,58	Produção de LAB/LAS	53	16159,91
Anidrido ftálico a partir de o-xileno	11	5796,62	SBR via polimerização por emulsão a frio	54	6098,17
Anidrido maleico via oxidação de benzeno	12	8433,53	SBR via polimerização por solução	55	7082,77
Benzeno via desproporcionação do tolueno	13	3071,88	SBR via polimerização por emulsão a quente	56	5974,31
Benzeno via hidrodealquilação do tolueno	14	5045,51	EPDM via polimerização em solução	57	6776,59
Bisfenol A via reação de fenol e acetona	15	6178,51	EPDM via polimerização em suspensão	58	5733,82
Butadieno via desidrogenação do n-butano	16	7974,84	PB via catalisador de cobalto	59	10469,95
Caprolactama via fenol	17	11658,87	PB via catalisador de Ziegler-natta com iodo	60	10550,10
Cumeno via benzeno e propeno	18	2918,13	PB via catalisador de níquel	61	9293,79
Cloreto de vinila a partir de eteno	19	7352,50	PC via fosgenação em solução contínua	62	13268,03
Cloreto de vinila via 1,2-Dicloroetano	20	10239,51	PC via fosgenação interfacial	63	12299,82
Cloro via eletrólise de cloreto de sódio	21	844,64	PC via fosgenação em solução continua em batelada	64	12989,83
Diisocianato de Difenilmetano (MDI) via anilina e fosgênio	22	7404,99	PVC via polimerização em massa	65	12778,89
Estireno via etilbenzeno (desidrogenação)	23	4411,03	PVC via polimerização em suspensão	66	13839,95
Estireno via etilbenzeno (processo hidroperóxido)	24	6464,81	PVC via polimerização em emulsão	67	14650,05

Processo de produção	j	Cj (R$/t)	Processo de produção	j	Cj (R$/t)
Eteno via craqueamento de etano-propano (50-50 %m)	25	3407,31	PVC via polimerização em emulsão (em batelada)	68	15538,36
Eteno via craqueamento de nafta (alta severidade)	26	3452,93	PS via polimerização em massa	69	4758,44
Eteno via pirólise de etano	27	3431,95	PS via polimerização em suspensão	70	5633,44
Eteno via pirólise de propano	28	4888,15	PS via polimerização em massa/suspensão	71	5881,66
Etilbenzeno via alquilação do benzeno	29	2811,78	PE HD via tecnologia Union Carbide	72	5053,28
Etilenoglicol via hidratação de óxido de eteno	30	4061,52	PE HD via tecnologia HOECHST	73	5055,42
Etilenoglicol via oxidação de eteno	31	4518,27	PE HD via tecnologia Stamicarbon	74	5122,61
Fenol via oxidação do cumeno	32	5383,97	PE HD via tecnologia Montedison	75	6082,14
Fenol via sulfonação do benzeno	33	5558,17	PE LD via reação em autoclave	76	7228,61
Formaldeído via oxidação do metanol	34	2771,53	PE LD via reação em autoclave de mistura	77	6952,61
Metacrilato de metila a partir de acetona	35	7516,33	PE LD em reator tubular	78	7314,81
Metacrilato de etila a partir de acetona	36	7763,93	Polietilenoglicol a partir de óxido de eteno	79	4146,89
Produção de Etanolaminas	37	3022,21	PET a partir de DMT e etilenoglicol	80	5717,75
Ftalatos a partir de n-butanol	38	3514,73	PET a partir de ácido tereftálico e etilenoglicol	81	6424,50
Nitrato de amônio via ácido nítrico e amônia	39	2594,33	Polipropilenoglicol a partir de óxido de propeno	82	5622,00
Metanol via gás natural (metano)	40	2090,94	PP via processo em fase líquida	83	7622,75
1-Butanol via propeno utilizando catalisador de cobalto-fosfina	41	3594,95	PP via processo em fase vapor	84	6275,41
1-Butanol via propeno utilizando catalisador de ródio	42	3636,06	PP via processo em lama	85	8530,82
Óxido de eteno via oxidação de eteno (ar)	43	5555,18	PP via processo em solução	86	8838,62

III.2.7 – Coeficientes técnicos de processo (a_{ij})

Os coeficientes técnicos de processo a_{ij} são fatores importantes, pois indicam o consumo ou produção de determinado produto através das restrições de balanço de massa. Ou seja, correlacionam um produto *i* a um determinado processo *j*. Estes coeficientes são calculados

levando em conta a reação principal do processo, bem como o rendimento do processo. Nota-se que os coeficientes apresentados por Rudd *et al.* 1981) levam em conta os rendimentos dos processos *j* à época.

Para os quatro processos cujas rotas tecnológicas não foram apresentadas por Rudd *et al.* (1981), os coeficientes foram calculados com base na reação principal, considerando um rendimento de 97 %. Os dados referentes aos coeficientes técnicos da indústria petroquímica brasileira são apresentados no Apêndice A, nas Tabelas A.1, A.2, A.3, A.4, A.5 e A.6, ressaltando que as células vazias representam a_{ij} igual a 0.

III.3 – Otimização da estrutura da indústria petroquímica

Otimizar uma indústria petroquímica significa torná-la mais produtiva a um custo anual menor. Este procedimento utiliza um modelo matemático que tem por objetivo o auxílio na tomada de decisões, como a escolha de novas unidades de processo, o aumento de capacidade ou a desativação das unidades existentes, a inserção de novos produtos no setor, a escolha de novas tecnologias e os estudos de variação na oferta das principais matérias-primas.

Os cenários avaliados incluem a resposta da indústria petroquímica à variação nas ofertas das principais matérias-primas: gás natural e nafta. Além disso, também serão feitas análises quanto ao preço de algumas matérias-primas e a tarifa energética.

A análise destes cenários pode indicar, por exemplo, a viabilidade de integrar refino e petroquímica, indicando se é lucrativo investir na produção de petroquímicos ou se é mais vantajoso exportar a quantidade excedente de matéria-prima, caso semelhante ao estudado por Mikkelsen e Rudd (1979).

Os resultados destas simulações podem ser uma inspiração para novos trabalhos e auxiliar na tomada de algumas decisões difíceis no planejamento do setor. Neste ponto, este trabalho se aproxima do estudo realizado sobre as reservas do Mar do Norte (MIKKELSEN e RUDD, 1979). A verificação da consistência dos dados levantados também será um resultado natural deste trabalho, principalmente no que se refere ao corte da indústria petroquímica delimitado no início do trabalho (LOUÇÂO JR. *et al*., 2015).

III.4 – Viabilizando o problema

Nas primeiras tentativas de modelagem da indústria brasileira, o resultado não foi tão satisfatório pois algumas restrições estavam sendo violadas. Assim, em alguns casos haveria uma produção negativa de um produto *i*, ou seja, um resultado sem sentido (LOUÇÃO JR., 2015).

Em Loução Jr. (2015), o modelo não apresentou um resultado ótimo viável. Contudo, associado ao pacote GAMS, existe um código para tornar viável um problema com pontos inviáveis. Este se baseia na remodelagem do problema, ou seja, na modificação das restrições originais. Esta técnica de relaxamento busca identificar as causas dessas inviabilidades. Entretanto, para executar a correção automática do modelo e, em seguida, analisar uma solução viável, alguns comandos são necessários (GAMS, 2013).

Esta algoritmo programado no *software* para o método Simplex (GAMS / Cplex) é conhecido como FeasOpt (.feasopt) e ativado pela adição do parâmetro feasopt ao modelo. Esta opção relaxa seletivamente os limites e restrições de forma que minimiza uma função de penalidade ponderada (GAMS, 2013). Dessa maneira, o relaxamento viável sugere a menor mudança no problema original de modo a alcançar a viabilidade. Ao final dos passos, esta técnica retorna uma solução viável para o GAMS e marca a flexibilização dos limites e restrições com o INFES MARK no relatório gerado pelo *software*.

Originalmente, todas as equações são candidatas para relaxação com igual peso, mas nenhuma das variáveis pode ser relaxada. Este comportamento padrão pode ser modificado através da atribuição de preferências de relaxamento para limites, variáveis e restrições (GAMS, 2013). Estas preferências podem ser convenientemente especificadas com a opção *FeasPref* (.feaspref).

A preferência nula significa que o limite ou restrição associado não deve ser modificado no processo de relaxação. A função de penalidade ponderada é construída a partir dessas preferências tal que, quanto maior for a preferência, mais provável será que um dado vinculado ou restrição seja flexibilizado (GAMS, 2013). Contudo, não é necessário especificar uma preferência exclusiva para cada limite ou intervalo. Na verdade, é convencional utilizar somente

os valores de 0 e 1; excetuando-se os casos em que o próprio problema sugere a atribuição de preferências explícitas.

O parâmetro *FeasOptMode* permite diferentes estratégias na relaxação que pode ser realizada em uma ou duas fases. Em sua primeira fase, tenta-se minimizar a relaxação do modelo inviável, isto é, tenta-se encontrar uma solução viável a partir de alterações mínimas. Na segunda fase, uma solução ótima é encontrada, usando a função objetivo original, entre aqueles pontos que exigem o máximo de relaxação considerado necessário na primeira fase (GAMS, 2013).

Os valores do parâmetro *FeasOptMode* indicam dois aspectos: parar na primeira fase ou continuar para a fase dois, e como medir a relaxação (GAMS, 2013):

0 - Minimizar a soma das relaxações. Minimizar a soma de todas as relaxações necessárias na primeira fase (fase única);
1 - Minimizar a soma das relaxações e otimizar. Minimizar a soma de todas as relaxações necessárias na primeira fase e executar segunda fase para encontrar a relaxação ótima entre as mínimas;
2 - Minimizar o número de relaxações. Minimizar o número de restrições e limites exigindo relaxação na primeira fase (fase única);
3 - Minimizar o número de relaxações e otimizar. Minimizar o número de restrições e limites exigindo relaxação na primeira fase e executar a segunda fase para encontrar a relaxação ótima entre as mínimas;
4 - Minimizar a soma dos quadrados das relaxações. Minimizar a soma dos quadrados das relaxações exigidas na primeira fase (fase única);
5 - Minimizar a soma dos quadrados dos relaxações e otimizar. Minimizar a soma dos quadrados das relaxações necessárias na primeira fase e executar a segunda fase para encontrar a relaxação ótima entre as mínimas.

Após aplicação desta técnica, foi obtido um modelo cuja relaxação o tornou viável através da modificação de algumas restrições ou limites. Desta maneira, temos um novo problema, remodelado a partir do original. A Figura III.5 apresenta a técnica implementada no algoritmo escrito em GAMS.

```
display 'Distribuir as infeasibilities como seguem',
        F.infeas, X.infeas, Q.infeas, supply.infeas, cap.infeas, demand.infeas;

$ifi %system.lp% == cplex  file fslv Solver Option file / cplex.opt /; case.optfile=1;

* Tentar mover as infeasibilities para um só lado
putclose fslv / 'feasopt 1' / 'equation.feaspref 0' / 'demand.feaspref 1';

Solve case using lp minimizing z ;

display 'Todas as infeasibilities devem ficar do mesmo lado', F.infeas, X.infeas, Q.infeas, demand.infeas;
abort$(sum((i), Q.infeas(i))) Q.infeas, demand.infeas;
abort$(sum(i,demand.infeas(i))<1e-5) Q.infeas, demand.infeas;

** Ajustando a demanda com base na relaxação encontrada
  D(i) = D(i)- demand.infeas(i);

Solve case using lp minimizing z ;

display 'Todas as infeasibilities devem ficar do mesmo lado', F.infeas, X.infeas, Q.infeas, demand.infeas;
abort$(sum((i), Q.infeas(i))) Q.infeas, demand.infeas;
abort$(sum(i,demand.infeas(i))<1e-5) Q.infeas, demand.infeas;
```

Figura III.5 – Técnica para remoção das inviabilidades implementada no GAMS.

Como é possível analisar na Figura III.5, primeiramente, se faz necessário observar a distribuição dos pontos inviáveis dentre as restrições violadas. Após esta primeira avaliação, é necessário escolher para qual ou quais restrições as inviabilidades serão direcionadas, de modo a reformular as restrições do problema original para um mesmo parâmetro ou de forma a impactar o menor número de parâmetros possíveis.

O parâmetro escolhido para flexibilização foi a demanda (D_i), pois este parâmetro pode indicar a exclusão de um produto da rede petroquímica ótima. Isto é, caso um produto i tenha sido colocado no recorte inicial erroneamente, esta técnica pode sugerir zerar a demanda deste petroquímico. Caso os parâmetros D_i e S_i sejam nulos, este produto não faz parte da indústria superestrutura petroquímica ótima, a não ser que esteja sendo produzido e consumido inteiramente na produção de outro produto final. Neste último caso, o produto não possui demanda, mas é importante para integração da rede petroquímica. Também serão feitos estudos com flexibilização do parâmetro fornecimento (S_i), ou seja, todos os produtos propostos farão parte da estrutura ótima, porém, os resultados indicarão quais serão importados para atender ao mercado interno.

Caso se consiga êxito em remover as inviabilidades, deve-se corrigir as restrições antigas, alterando o valor dos limites com base nos novos pontos inviáveis deslocados. Ao final,

provavelmente o modelo apresentará uma solução viável, ou seja, todas as inviabilidades já terão sido eliminadas.

O algoritmo implementado que permite a aplicação desta técnica é baseado na inclusão de variáveis de folga. Estas variáveis compensam as restrições selecionadas para relaxação de modo a tornar o modelo viável através da modificação dos limites escolhidos. Dessa forma, para relaxação das restrições de demanda, as variáveis de folga atuam diminuindo os limites de demanda até que o modelo se torne viável. É preciso ressaltar que as alterações são feitas de modo que haja o menor número de alterações possível nas equações de restrição.

CAPÍTULO IV – RESULTADOS

A solução do problema de programação linear final abordado por Loução Jr. (2015) referente à superestrutura da indústria petroquímica brasileira apresentou alguns pontos inviáveis. Contudo, através da técnica de otimização disponibilizada pelo *software* utilizado, todas as inviabilidades foram eliminadas. O código base escrito no *software* GAMS encontra-se no Apêndice B deste trabalho.

IV.1 – Solução do problema original com flexibilização das restrições de demanda

A solução do problema original com flexibilização das restrições de demanda são apresentados nas Tabelas IV.1 e IV.2, ressaltando que, independentemente da função objetivo utilizada, os resultados são os mesmos, exceto o custo anual da indústria petroquímica. Desta maneira, é possível observar quais produtos fazem parte de uma rede petroquímica ótima sem nenhuma alteração na entrada da indústria petroquímica, ou seja, no fornecimento das matérias-primas e intermediários.

Tabela IV.1 – Resultados das variáveis F_i e Q_i.

i	Produtos	Fi (tonelada/ano)	Si (tonelada/ano)	Di (tonelada/ano)	Qi (tonelada/ano)
1	1,2-Dicloroetano (DCE)	.	.	4,00E+05	4,00E+05
2	2 Etil-Hexanol	.	.	1,01E+05	1,01E+05
3	Acetona	.	.	1,13E+05	1,13E+05
4	Ácido Adípico	.	.	3,76E+04	3,76E+04
5	Ácido Nítrico	.	.	4,92E+05	4,92E+05
6	Ácido Sulfúrico	.	.	1,96E+05	1,96E+05
7	Ácido Tereftálico (TPA)	.	.	2,50E+05	2,50E+05
8	Acrilonitrila	.	.	.	.
9	Amônia	.	.	8,13E+05	8,13E+05
10	Anidrido Ftálico	.	.	9,74E+04	1,12E+05
11	Anidrido Maleico	.	.	.	.
12	Benzeno	.	.	1,27E+04	1,27E+04
13	Bisfenol A	.	.	.	.
14	Butadieno	.	.	2,57E+05	2,57E+05
15	Caprolactama	.	.	5,60E+04	5,60E+04
16	Cloreto de Vinila (MVC)	.	.	7,00E+05	7,00E+05
17	Cloro	.	.	1,01E+06	1,01E+06
18	Cumeno	.	.	.	.

i	Produtos	Fi (tonelada/ano)	Si (tonelada/ano)	Di (tonelada/ano)	Qi (tonelada/ano)
19	Diisocianato de Difenilmetano (MDI)	.	.	1,70E+05	1,70E+05
20	EPDM (Etileno-Propileno-Dieno Monômero)/EPM (Etileno-Propileno Monômero)	.	.	2,20E+04	2,20E+04
21	Estireno	.	.	.	.
22	Etano	1,79E+06	1,79E+06	.	.
23	Etanolaminas	.	.	.	.
24	Eteno	.	.	3,11E+06	3,51E+06
25	Etilbenzeno	.	.	.	.
26	Etilenoglicol	.	.	3,12E+05	3,12E+05
27	Fenol	.	.	9,75E+04	9,75E+04
28	Formaldeído	.	.	.	.
29	Ftalatos	.	.	7,18E+04	7,18E+04
30	Gás Natural	1,89E+06	1,38E+07		.
31	LAB/LAS (Alquilbenzeno Linear)	.	.	.	.
32	Metacrilato de Etila	.	.	.	.
33	Metacrilato de Metila	.	.	.	.
34	Metanol	.	.	4,55E+05	4,55E+05
35	m-Xileno	1,14E+05	1,14E+05	2,20E+04	2,20E+04
36	Nafta	6,74E+06	6,74E+06	.	.
37	n-Butano	5,00E+05	5,00E+05	.	.
38	n-Butanol	.	.	1,23E+05	1,23E+05
39	Nitrato de Amônio	.	.	1,78E+05	1,78E+05
40	Óxido de Eteno	.	.	2,61E+05	2,61E+05
41	Óxido de Propeno	.	.	1,32E+05	1,32E+05
42	o-Xileno	.	.	6,00E+04	6,00E+04
43	Polibutadieno (PB)	.	.	6,03E+03	6,03E+03
44	Policarbonato (PC)	.	.	3,08E+04	3,08E+04
45	Policloreto de Vinila (PVC)	.	.	5,36E+05	5,36E+05
46	Poliestireno (PS)	.	.	.	.
47	Polietileno (HDPE e LDPE)	.	.	2,13E+06	3,04E+06
48	Polietilenoglicol	.	.	6,50E+03	6,50E+03
49	Polietilenotereftalato (PET)	.	.	5,22E+05	5,22E+05
50	Polipropileno (PP)	.	.	.	.
51	Polipropilenoglicol	.	.	6,64E+03	6,64E+03
52	Propano	1,11E+07	2,10E+07	.	.
53	Propeno	.	.	1,08E+06	1,08E+06
54	Propilenoglicol	.	.	3,46E+04	3,46E+04

i	Produtos	Fi (tonelada/ano)	Si (tonelada/ano)	Di (tonelada/ano)	Qi (tonelada/ano)
55	p-Xileno	.	.	1,96E+04	1,96E+04
56	SBR (Borracha de Butadieno Estireno)	.	.	.	.
57	Soda	8,49E+05	1,35E+06	2,51E+06	2,51E+06
58	Sulfato de Amônio	.	.	2,46E+05	2,46E+05
59	Tolueno	2,05E+05	2,05E+05	.	.
60	Uréia	.	.	3,56E+06	3,56E+06

Analisando apenas a Tabela IV.1, é possível notar que alguns produtos apresentaram demanda igual a zero, diferente do proposto inicialmente. Isto se deve a técnica utilizada para remoção das inviabilidades, ou seja, com estes resultados temos uma nova estrutura petroquímica otimizada, com a exclusão de alguns produtos e intermediários.

É possível perceber que na maioria dos casos onde a demanda foi zerada, os produtos são polímeros ou intermediários necessários à produção destes polímeros. O poliestireno, por exemplo, apresenta demana nula assim como a principal matéria-prima para produção deste polímero. Este resultado deve ser interpretado não como uma exclusão do poliestireno e do estireno da indústria petroquímica, mas como uma indicação de que, no atual panorama deste segmento da indústria química, sem modificação nas tecnologias adotadas ou na oferta das principais matérias-primas, a produção deste polímero e dos outros cuja demanda foi zerada não forma a superestrutura que apresenta custo anual menor. Desta forma, estes polímeros e seus intermediários deverão ser importados para atender ao mercado interno.

Tabela IV.2 – Resultados de quantidade produzida pelos processos *j* (X_j) na rede petroquímica.

i	Produtos	Xj (tonelada/ano)	Bj (tonelada/ano)
1	1,2-Dicloroetano via cloração de etileno	1,08E+06	1,08E+06
2	2 – Etilhexanol via processo OXO	1,01E+05	1,01E+05
3	Acetona via oxidação do propileno	1,46E+04	1,19E+05
4	Ácido adípico via oxidação do ciclohexanol com ácido nítrico	3,76E+04	8,70E+04
5	Ácido nítrico, 95%, via amônia	6,62E+05	6,62E+05
6	Ácido sulfúrico via processo de absorção dupla	3,17E+05	8,21E+06
7	Ácido tereftálico, cru, via p-xileno	2,50E+05	2,50E+05
8	Acrilonitrila via amoxidação do propileno	.	1,00E+05
9	Amônia via reforma do gás natural	1,59E+06	1,59E+07
10	Amônia via reforma de nafta	1,59E+06	1,59E+06

i	Produtos	Xj (tonelada/ano)	Bj (tonelada/ano)
11	Anidrido ftálico a partir de o-xileno	1,52E+05	1,52E+05
12	Anidrido maléico via oxidação de benzeno	.	3,00E+04
13	Benzeno via desproporcionação do tolueno	.	9,99E+05
14	Benzeno via hidrodealquilação do tolueno	1,71E+05	9,99E+05
15	Bisfenol A via reação de fenol e acetona	2,80E+04	2,80E+04
16	Butadieno via desidrogenação do n-butano	2,63E+05	4,66E+05
17	Caprolactama via fenol	5,60E+04	5,60E+04
18	Cumeno via benzeno e propeno	2,35E+05	3,20E+05
19	Cloreto de vinila a partir de etileno	8,43E+05	8,43E+05
20	Cloreto de vinila via 1,2-Dicloroetileno	4,10E+05	8,43E+05
21	Cloro via eletrólise de cloreto de sódio	1,52E+06	1,52E+06
22	Diisocianato de Difenilmetano (MDI) via anilina e fosgênio	1,70E+05	1,90E+05
23	Estireno via etilbenzeno (desidrogenação)	.	5,40E+05
24	Estireno via etilbenzeno (processo hidroperóxido)	.	3,95E+06
25	Etileno via craqueamento de etano-propano (50-50 %m)	1,95E+06	3,95E+06
26	Etileno via craqueamento de nafta (alta severidade)	1,58E+06	3,95E+06
27	Etileno via pirólise de etano	.	3,95E+06
28	Etileno via pirólise de propano	3,95E+06	3,95E+06
29	Etilbenzeno via alquilação do benzeno	.	7,70E+05
30	Etilenoglicol via hidratação de óxido de etileno	5,00E+05	5,00E+05
31	Etilenoglicol via oxidação de etileno	.	5,00E+05
32	Fenol via oxidação do cumeno	1,74E+05	1,96E+05
33	Fenol via sulfonação do benzeno	.	1,96E+05
34	Formaldeído via oxidação do metanol	2,72E+04	7,88E+05
35	Metacrilato de metila a partir de acetona	.	1,00E+05
36	Metacrilato de etila a partir de acetona	.	5,00E+04
37	Produção de Etanolaminas	1,43E+05	1,43E+05
38	Ftalatos a partir de n-butanol	7,18E+04	2,66E+05
39	Nitrato de amônio via ácido nítrico e amônia	1,78E+05	5,73E+05
40	Metanol via gás natural (metano)	3,10E+05	3,10E+05
41	1-Butanol via propileno utilizando catalisador de cobalto-fosfina	.	1,50E+05
42	1-Butanol via propileno utilizando catalisador de ródio	1,32E+05	1,50E+05
43	Óxido de etileno via oxidação de etileno (ar)	2,62E+05	5,00E+06
44	Óxido de etileno via oxidação de etileno (oxigênio)	5,00E+05	5,00E+06
45	Óxido de propileno via oxidação de propileno	1,70E+05	2,35E+05
46	Propilenoglicol via hidratação de óxido de propileno	3,50E+04	8,60E+04
47	p - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	1,96E+04	2,03E+05
48	p - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	.	2,03E+05

i	Produtos	Xj (tonelada/ano)	Bj (tonelada/ano)
49	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	6,00E+04	1,26E+05
50	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	.	1,26E+05
51	Uréia via processo de reciclo total	1,78E+06	1,78E+06
52	Uréia via amônia e dióxido de carbono	1,78E+06	1,78E+06
53	LAB/LAS	.	1,00E+04
54	SBR via polimerização por emulsão a frio	.	1,08E+05
55	SBR via polimerização por solução	.	1,08E+05
56	SBR via polimerização por emulsão a quente	.	1,08E+05
57	EPDM via polimerização em solução	.	4,20E+04
58	EPDM via polimerização em suspensão	2,20E+04	4,20E+04
59	PB via catalisador de cobalto	.	1,43E+04
60	PB via catalisador ziegler-natta com iodo	.	1,43E+04
61	PB via catalisador de níquel	6,03E+03	1,43E+04
62	PC via fosgenação em solução contínua	1,50E+04	1,50E+04
63	PC via fosgenação interfacial	1,50E+04	1,50E+04
64	PC via fosgenação em batelada	7,69E+02	1,50E+04
65	PVC via polimerização em massa	.	7,29E+05
66	PVC via polimerização em suspensão	5,36E+05	7,29E+05
67	PVC via polimerização em emulsão	.	7,29E+05
68	PVC via polimerização em emulsão (em batelada)	.	7,29E+05
69	PS via polimerização em massa	.	5,86E+05
70	PS via polimerização por suspensão	.	5,86E+05
71	PS via polimerização em massa/suspensão	.	5,86E+05
72	PE HD via tecnologia Union Carbide	.	3,04E+06
73	PE HD via tecnologia HOECHST	3,04E+06	3,04E+06
74	PE HD via tecnologia Stamicarbon	.	3,04E+06
75	PE HD via tecnologia Montedison	.	3,04E+06
76	PE LD via reação em autoclave	.	3,04E+06
77	PE LD via reação em autoclave de mistura	.	3,04E+06
78	PE LD em reator tubular	.	3,04E+06
79	Polietilenoglicol a partir de óxido de eteno	6,50E+03	1,00E+04
80	PET a partir de DMT e etilenoglicol	5,22E+05	5,85E+05
81	PET a partir de ácido tereftálico e etilenoglicol	.	5,85E+05
82	Polipropilenoglicol a partir de óxido de propeno	6,64E+03	1,00E+04
83	PP via processo em fase líquida	.	1,97E+06
84	PP via processo em fase vapor	.	1,97E+06
85	PP via processo em lama	.	1,97E+06
86	PP via processo em solução	.	1,97E+06

Os resultados apresentados na Tabela IV.2 indicam as rotas tecnológicas que compõem o segmento petroquímico nacional, bem como a restrição atual para capacidade de produção (capacidade instalada). Os custos anuais considerando as equações II.1 e II.2 foram, respectivamente, R$100.600.000.000,00 e R$97.430.000.000,00. Esta diferença é compreensível, pois a Equação II.1 apresenta no terceiro termo, ($P_i - H_i$), enquanto a II.2, ($-H_i$), ou seja, a terceira parcela da Equação II.2 é mais negativa, assim o custo anual se torna menor. Em termos matemáticos isso representa uma vantagem econômica, contudo ao considerar a queima de todo excedente em vez do custo de oportunidade, a função objetivo II.2 também considera limitado o crescimento da indústria petroquímica analisada, por esta razão esta equação é mais utilizada em países menos desenvolvidos.

A análise da Tabela IV.2 reforça as observações sobre a não produção de alguns polímeros como SBR, poliestireno e polipropileno. As rotas tecnológicas associadas à produção destes polímeros apresentaram X_j igual a zero. Porém, no caso das etanolaminas, a Tabela IV.2 apresenta produção diferente de zero enquanto a Tabela IV.1 apresenta demanda nula para este petroquímico. Uma avaliação mais criteriosa destas tabelas revela que embora sejam produzidas, as etanolaminas são utilizadas dentro da rede ótima, mais especificamente na produção de ácido sulfúrico através do tratamento do gás natural.

Logo, a rede ótima não produz etanolaminas para o mercado, apenas para consumo interno. O impacto vai além da demanda por este petroquímico, por ser matéria-prima importante na produção de linear alquilbenzeno (LAB), sua utilização exclusiva na produção de ácido sulfúrico afeta na produção de LAB, que é nula assim como sua demanda. Portanto, dentro desta superestrutura ótima, o LAB também deve ser importado para atender ao mercado interno do país.

IV.2 – Análises de sensibilidade da indústria petroquímica (com flexibilização das restrições de demanda)

Os estudos de caso realizados compreendem desde impactos no custo anual do setor, como na estrutura petroquímica proposta como resultado da otimização. O primeiro estudo de caso apresentado considera o impacto de uma variação no preço da energia elétrica, que impacta diretamente nos parâmetros H_i e C_j, e consequentemente no custo anual.

Tabela IV.3 – Comparativo entre os custos anuais com a variação no preço da energia elétrica.

Variação do parâmetro P_i	$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j^* X_j - \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(H_i)$	$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j X_j + \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(P_i - H_i)$
Problema original (R$/ano)	R$ 97.430.000.000,00	R$ 100.600.000.000,00
Eletricidade (-20%)	-2,65%	2,58%
Eletricidade (-10%)	-1,32%	1,29%
Eletricidade (+10%)	1,32%	-1,26%
Eletricidade (+20%)	2,64%	-2,54%

Conforme esperado, o aumento do preço da energia elétrica acarreta em maiores gastos para o setor. Consequentemente, uma menor tarifa sobre a energia elétrica está associada a um custo anual mais baixo. Entretanto, nenhuma das outras variáveis sofreram alteração. Em Rudd *et al.* (1981) foi constatado que alterações no valor da energia poderiam mudar a organização do setor com relação as rotas tecnológicas utilizadas. Isto não pode ser constatado na indústria brasileira devido a utilização de poucas rotas para produção de um mesmo petroquímico. Desta forma, as variações na tarifa não foram suficientes para tornar um processo de produção mais vantajoso do que outro.

Foram também analisadas as consequências das flutuações de preços da principais matérias-primas da cadeia petroquímica. Na Tabela IV.4, são apresentados os custos anuais considerando variações de -20%, -10%, 10% e 20% no preço de compra das principais matérias-primas, nafta, gás natural, etano e propano.

Tabela IV.4 – Comparativo entre os custos anuais com a variação no preço das principais matérias-primas.

Variação do parâmetro P_i	$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j^* X_j - \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(H_i)$	$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j X_j + \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(P_i - H_i)$
Problema original (R$/ano)	R$ 97.430.000.000,00	R$ 100.600.000.000,00
Etano+Propano (-20%)	-1,48%	-1,49%
Etano+Propano (-10%)	-0,78%	-0,74%
Etano+Propano (+10%)	0,78%	0,80%
Etano+Propano (+20%)	1,56%	1,49%
Gás Natural (-20%)	-0,24%	-0,20%
Gás Natural (-10%)	-0,11%	-0,10%
Gás Natural (+10%)	0,12%	0,10%
Gás Natural (+20%)	0,24%	0,30%
Nafta (-20%)	-2,13%	-2,04%
Nafta (-10%)	-1,07%	-1,01%
Nafta (+10%)	1,07%	1,09%
Nafta (+20%)	2,13%	2,09%

A partir da Tabela IV.4, percebe-se a fragilidade do setor petroquímico diante do preço da nafta. Verificar isto via modelo matemático nos sugere que os resultados estão dentro da realidade do país, visto que a nafta é considerada um dos gargalos da indústria petroquímica no Brasil. Por não possuir reservas com óleo de boa qualidade, não possui nafta suficiente para atender sua demanda e assim se submete à importação, expondo o segmento, o tornando bastante sensível a estas flutuações. Além disso, parte da nafta também é utilizada na produção de combustíveis, limitando a oferta desta matéria-prima ao setor petroquímico (BAIN & COMPANY, 2014).

Além disso, como grande parte dos processos petroquímicos utilizam nafta como matéria-prima, é de se esperar um impacto maior no custo anual quando há alteração de qualquer variável ou parâmetro associado à nafta. Entretanto, como não existem muitas rotas alternativas, uma alta no preço das matérias-primas não está associada, neste caso, a uma mudança nos resultados com relação à estrutura da superestrutura petroquímica ótima. De maneira mais clara, apenas o custo anual é alterado, conforme ocorre com as variações no preço da energia.

Foi avaliado, ainda, o comportamento da indústria petroquímica nos casos de escassez de produtos chave para a rede petroquímica. Porém, ao propor variações no fornecimento destes petroquímicos, as restrições de demanda são alteradas. Deste modo, uma nova estrutura petroquímica é proposta como resposta aos dados alterados. A Tabela IV.5 apresenta as alterações com relação aos resultados do modelo original.

Tabela IV.5 – Variáveis e parâmetros alterados a partir de cortes no fornecimento da nafta.

		0% de Nafta		25% de Nafta		50% de Nafta		100% de Nafta	
i	Produtos	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)
36	Nafta	.	.	1,69E+06	1,69E+06	3,37E+06	3,37E+06	6,74E+06	6,74E+06
i	Produtos	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)
9	Amônia	.	.	8,13E+05	8,13E+05	8,13E+05	8,13E+05	8,13E+05	8,13E+05
12	Benzeno	1,28E+04	1,28E+04	1,27E+04	1,27E+04	1,27E+04	1,27E+04	1,27E+04	1,27E+04
17	Cloro	1,23E+06	1,23E+06	1,23E+06	1,23E+06	1,01E+06	1,01E+06	1,01E+06	1,01E+06
24	Eteno	3,11E+06	3,11E+06	3,11E+06	3,11E+06	3,11E+06	3,11E+06	3,11E+06	3,51E+06
45	Policloreto de Vinila (PVC)	1,79E+05	1,79E+05	1,84E+05	1,84E+05	5,36E+05	5,36E+05	5,36E+05	5,36E+05
47	Polietileno (HDPE e LDPE)	2,12E+06	2,12E+06	2,13E+06	2,13E+06	2,13E+06	2,42E+06	2,13E+06	3,04E+06
53	Propeno	8,75E+04	8,75E+04	1,02E+05	1,02E+05	4,29E+05	4,29E+05	1,08E+06	1,08E+06
60	Uréia	2,20E+06	2,20E+06	3,56E+06	3,56E+06	3,56E+06	3,56E+06	3,56E+06	3,56E+06

Diante do apresentado, apenas o fornecimento da nafta é alterado, indicando que não há outro petroquímico que seja capaz de substituir a escassez de nafta sem alterar a rede integrada de produtos. Com relação aos produtos, a amônia é a que possui maior ligação, visto que, no caso extremo onde a nafta não faz parte deste segmento da indústria química brasileira, sua produção via reforma da nafta é zerada, bem como sua demanda externa. Quanto ao cloro, é possível perceber que há um aumento na quantidade produzida. Este aumento está relacionado à diminuição da produção de cloreto de vinila a partir de etileno, onde o cloro é uma das matérias-primas.

Tabela IV.6 – Alterações nos processos de produção a partir de cortes no fornecimento da nafta.

		0% de Nafta		25% de Nafta		50% de Nafta		100% de Nafta	
j	Processos	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)
10	Amônia via reforma de nafta	.	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06
19	Cloreto de vinila a partir de etileno	4,75E+05	8,43E+05	4,80E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05
26	Etileno via craqueamento de nafta (alta severidade)	.	3,95E+06	2,01E+04	3,95E+06	5,39E+05	3,95E+06	1,58E+06	3,95E+06
52	Uréia via amônia e dióxido de carbono	4,22E+05	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06
57	EPDM via polimerização em solução	2,20E+04	4,20E+04	.	4,20E+04	.	4,20E+04	.	4,20E+04
58	EPDM via polimerização em suspensão	.	4,20E+04	2,20E+04	4,20E+04	2,20E+04	4,20E+04	2,20E+04	4,20E+04
65	PVC via polimerização em massa	1,79E+05	7,29E+05	.	7,29E+05	.	7,29E+05	.	7,29E+05
66	PVC via polimerização em suspensão	.	7,29E+05	1,84E+05	7,29E+05	5,36E+05	7,29E+05	5,36E+05	7,29E+05
72	PE HD via tecnologia Union Carbide	2,12E+06	3,04E+06	2,13E+06	3,04E+06	.	3,04E+06	.	3,04E+06
73	PE HD via tecnologia HOECHST	.	3,04E+06	.	3,04E+06	2,42E+06	3,04E+06	3,04E+06	3,04E+06

A análise quanto aos processos de produção mediante cortes no fornecimento indica que os processos dependentes da nafta têm sua produção decrescendo quanto maior o corte no fornecimento. Também é possível notar que os polímeros EPDM, PVC e PE possuem suas rotas de produção alteradas conforme o corte da nafta aumenta, sem alterar a demanda por estes produtos. É preciso levar em conta que a demanda possuir valor igual a zero não quer dizer que o produto tenha sido substituído no mercado, quer dizer apenas que este não faz mais parte da estrutura petroquímica ótima integrada.

A Tabela IV.7 mostra que quando o fornecimento de gás natural é cortado, a indústria petroquímica se rearranja e passa a comprar mais soda para minimizar a escassez desta importante matéria-prima. Outro resultado interessante é a produção de etanolaminas quando o fornecimento de gás natural é interrompido. O processo de produção de H_2S depende do tratamento do gás natural utilizando etanolaminas; assim, quando não há gás natural, toda a produção de etanolaminas passa a ser direcionada ao mercado. Assim, as etanolaminas que eram produzidas apenas para reação com o gás natural, entram na rede como produto final.

Tabela IV.7 – Variáveis e parâmetros alterados a partir de cortes no fornecimento de gás natural.

		0% de GN		25% de GN		50% de GN		100% de GN	
i	Produtos	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)
30	Gás Natural	.	.	1,89E+06	3,45E+06	1,89E+06	6,90E+06	1,89E+06	1,38E+07
57	Soda	1,35E+06	1,35E+06	8,51E+05	1,35E+06	8,51E+05	1,35E+06	8,49E+05	1,35E+06
i	Produtos	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)
9	Amônia	.	.	8,13E+05	8,13E+05	8,13E+05	8,13E+05	8,13E+05	8,13E+05
10	Anidrido Ftálico	9,74E+04	1,30E+05	9,74E+04	1,12E+05	9,74E+04	1,12E+05	9,74E+04	1,12E+05
12	Benzeno	3,58E+04	3,58E+04	1,27E+04	1,27E+04	1,27E+04	1,27E+04	1,27E+04	1,27E+04
16	Cloreto de Vinila (MVC)	4,10E+05	4,10E+05	7,00E+05	7,00E+05	7,00E+05	7,00E+05	7,00E+05	7,00E+05
17	Cloro	.	.	1,01E+06	1,01E+06	1,01E+06	1,01E+06	1,01E+06	1,01E+06
23	Etanolaminas	8,37E+04	8,37E+04	.	.	.	.	.	.
29	Ftalatos	3,96E+04	3,96E+04	7,18E+04	7,18E+04	7,18E+04	7,18E+04	7,18E+04	7,18E+04
34	Metanol	1,45E+05	1,45E+05	4,55E+05	4,55E+05	4,55E+05	4,55E+05	4,55E+05	4,55E+05
38	n-Butanol	.	.	1,23E+05	1,23E+05	1,23E+05	1,23E+05	1,23E+05	1,23E+05
44	Policarbonato (PC)	.	.	3,08E+04	3,08E+04	3,08E+04	3,08E+04	3,08E+04	3,08E+04
45	Policloreto de Vinila (PVC)	.	.	5,36E+05	5,36E+05	5,36E+05	5,36E+05	5,36E+05	5,36E+05
51	Polipropilenoglicol	.	.	6,64E+03	6,64E+03	6,64E+03	6,64E+03	6,64E+03	6,64E+03
53	Propeno	1,21E+06	1,21E+06	1,08E+06	1,08E+06	1,08E+06	1,08E+06	1,08E+06	1,08E+06
57	Soda	1,32E+06	1,32E+06	2,51E+06	2,51E+06	2,51E+06	2,51E+06	2,51E+06	2,51E+06
60	Uréia	2,22E+06	2,22E+06	3,56E+06	3,56E+06	3,56E+06	3,56E+06	3,56E+06	3,56E+06

A Tabela IV.8 mostra que a produção de etanolaminas diminui, visto que não há mais como atender a rota de produção de H_2S. É possível notar uma mudança no processo de produção de alguns polímeros, tal qual ocorre com as variações no fornecimento de nafta. A maioria dos processos de produção mostrados na tabela acima apresenta X_j igual a zero quando o fornecimento é cortado completamente. Isto se deve ao fato de que existem poucas rotas alternativas, de forma semelhante ao observado no estudo de caso da nafta.

Tabela IV.8 – Alterações nos processos de produção a partir de cortes no fornecimento de gás natural.

		0% de GN		25% de GN		50% de GN		100% de GN	
j	Processos	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)
3	Acetona via oxidação do propileno	2,20E+04	1,19E+05	1,46E+04	1,19E+05	1,46E+04	1,19E+05	1,46E+04	1,19E+05
6	Ácido sulfúrico via processo de absorção dupla	.	8,21E+06	3,17E+05	8,21E+06	3,17E+05	8,21E+06	3,17E+05	8,21E+06
9	Amônia via reforma do gás natural	.	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06
15	Bisfenol A via reação de fenol e acetona	.	2,80E+04	2,80E+04	2,80E+04	2,80E+04	2,80E+04	2,80E+04	2,80E+04
18	Cumeno via benzeno e propeno	2,01E+05	3,20E+05	2,35E+05	3,20E+05	2,35E+05	3,20E+05	2,35E+05	3,20E+05
19	Cloreto de vinila a partir de etileno	.	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05
21	Cloro via eletrólise de cloreto de sódio	.	1,52E+06	1,52E+06	1,52E+06	1,52E+06	1,52E+06	1,52E+06	1,52E+06
32	Fenol via oxidação do cumeno	1,49E+05	1,96E+05	1,74E+05	1,96E+05	1,74E+05	1,96E+05	1,74E+05	1,96E+05
37	Produção de Etanolaminas	8,37E+04	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05
38	Ftalatos a partir de n-butanol	3,96E+04	2,66E+05	7,18E+04	2,66E+05	7,18E+04	2,66E+05	7,18E+04	2,66E+05
40	Metanol via gás natural (metano)	.	3,10E+05	3,10E+05	3,10E+05	3,10E+05	3,10E+05	3,10E+05	3,10E+05
42	1-Butanol via propileno utilizando catalisador de ródio	.	1,50E+05	1,32E+05	1,50E+05	1,32E+05	1,50E+05	1,32E+05	1,50E+05
43	Óxido de etileno via oxidação de etileno (ar)	2,37E+05	5,00E+05	2,62E+05	5,00E+05	2,62E+05	5,00E+05	2,62E+05	5,00E+05
45	Óxido de propileno via oxidação de propileno	1,63E+05	2,35E+05	1,70E+05	2,35E+05	1,70E+05	2,35E+05	1,70E+05	2,35E+05
46	Propilenoglicol via hidratação de óxido de propileno	3,46E+04	8,60E+04	3,50E+04	8,60E+04	3,50E+04	8,60E+04	3,50E+04	8,60E+04
49	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	.	1,26E+05	.	1,26E+05	.	1,26E+05	6,00E+04	1,26E+05
50	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	6,00E+04	1,26E+05	6,00E+04	1,26E+05	6,00E+04	1,26E+05	.	1,26E+05
51	Uréia via processo de reciclo total	4,40E+05	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06	1,78E+06
62	PC via solução contínua	.	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04
63	PC via fosgenação interfacial	.	1,50E+04	7,69E+02	1,50E+04	7,69E+02	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04
64	PC via bath solution	.	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04	1,50E+04	7,69E+02	1,50E+04
65	PVC via polimerização bulk	.	7,29E+05	5,36E+05	7,29E+05	5,36E+05	7,29E+05	.	7,29E+05
66	PVC via polimerização por suspensão	.	7,29E+05	.	7,29E+05	.	7,29E+05	5,36E+05	7,29E+05
72	PE HD via tecnologia Union Carbide	3,04E+06	3,04E+06	.	3,04E+06	.	3,04E+06	.	3,04E+06
73	PE HD via tecnologia HOECHST	.	3,04E+06	3,04E+06	3,04E+06	3,04E+06	3,04E+06	3,04E+06	3,04E+06
82	Polipropilenoglicol a partir de óxido de propeno	.	1,00E+04	6,64E+03	1,00E+04	6,64E+03	1,00E+04	6,64E+03	1,00E+04

Comparando os resultados das variações no fornecimento da nafta e do gás natural, é possível notar que o impacto nos produtos componentes da estrutura ótima é maior no corte total de nafta, uma vez que mais petroquímicos são excluídos da rede ($D_i = 0$).

Outra análise importante é com relação à produção da amônia. Considerando que existem duas possíveis rotas, uma via reforma do gás natural e outra via reforma da nafta, é interessante questionar o porquê da produção de amônia ter sido nula quando não há nafta disponível, enquanto a amônia continua a ser produzida no caso onde não há gás natural. Isto se deve ao fato de que a quantidade de gás natural no caso extremo do corte de nafta não foi suficiente para suprir todas as lacunas deixadas. Assim, a rede ótima, em se tratando de custo anual, foi obtida a partir da exclusão da amônia e alguns outros petroquímicos.

Para o estudo de caso de variação de fornecimento de matérias-primas, o custo anual não é o melhor critério de análise. O caso extremo para a nafta (0% de fornecimento) indica uma estrutura petroquímica com menos produtos e portanto mais simples do que a apresentada no corte total de gás natural. Logo, uma estrutura simplificada tende a possuir um custo anual menor, exatamente como ocorre neste exemplo. Isto significa que as análises para este estudo de caso envolvem apenas os produtos e processos que fazem parte da rede otimizada.

A comparação entre os estudos de caso onde somente o custo anual foi alterado indica o preço da nafta e da energia elétrica como os principais gargalos da indústria petroquímica brasileira. Conforme explicado, a nafta por ser exportada em grandes volumes e a energia elétrica por ser uma das mais custosas do mundo. Embora o Brasil tenha um potencial energético elevado, as tarifas são extremamente elevadas. Nesta comparação, embora a diferença seja pequena, a nafta ainda possui um impacto maior sobre o custo anual.

Conforme análise dos estudos de caso e do modelo original, é possível perceber que a técnica de otimização aplicada às restrições de demanda interfere na rede petroquímica ótima através da redução dos produtos pertencentes a superestrutura ótima. Existem outras possibilidades de aplicação desta técnica disponível no GAMS, é possível mover as inviabilidades para outra restrição, por exemplo o limite de fornecimento à indústria petroquímica, e aplicar a técnica para viabilizar o problema.

IV.3 – Solução do problema original com flexibilização das restrições de fornecimento

Ressalta-se a importância desta avaliação na determinação de quais produtos necessitam ser importados para atender às demandas do mercado. Na primeira modelagem, a superestrutura ganha forma através da modificação da demanda. Nesta nova modelagem, a rede ótima se forma após a definição de quais petroquímicos devem ser importados para atender ao mercado brasileiro, utilizando as rotas tecnológicas disponíveis na indústria e sem excluir qualquer produto da rede ótima. Contudo, dependendo do custo de produção e do preço de venda, alguns petroquímicos podem ser importados em maior volume do que sua produção dentro da rede ótima.

As Tabelas IV.9 e IV.10 apresentam os resultados da simulação considerando a modificação das restrições de fornecimento para viabilização do problema. Independente da função objetivo utilizada, os resultados são os mesmos, exceto o custo anual da indústria petroquímica.

Tabela IV.9 – Resultados das variáveis F_i e Q_i - Alterações no fornecimento.

i	Produtos	Fi (tonelada/ano)	Si (tonelada/ano)	Di (tonelada/ano)	Qi (tonelada/ano)
1	1,2-Dicloroetano (DCE)	.	.	4,00E+05	4,00E+05
2	2 Etil-Hexanol	.	.	1,01E+05	1,01E+05
3	Acetona	.	.	1,13E+05	1,13E+05
4	Ácido Adípico	.	.	3,76E+04	3,76E+04
5	Ácido Nítrico	.	.	4,92E+05	4,92E+05
6	Ácido Sulfúrico	.	.	7,29E+06	7,29E+06
7	Ácido Tereftálico (TPA)	3,42E+05	3,42E+05	5,92E+05	5,92E+05
8	Acrilonitrila	2,39E+04	2,39E+04	2,39E+04	2,39E+04
9	Amônia	8,59E+05	8,59E+05	1,67E+06	1,67E+06
10	Anidrido Ftálico	.	.	9,74E+04	1,12E+05
11	Anidrido Maleico	3,34E+04	3,34E+04	3,34E+04	3,34E+04
12	Benzeno	4,76E+05	4,76E+05	6,46E+05	6,46E+05
13	Bisfenol A	3,14E+04	3,14E+04	1,84E+04	1,84E+04
14	Butadieno	3,89E+04	3,89E+04	2,57E+05	2,57E+05
15	Caprolactama	7,63E+03	7,63E+03	6,36E+04	6,36E+04
16	Cloreto de Vinila (MVC)	.	.	7,00E+05	7,00E+05
17	Cloro	2,24E+05	2,24E+05	1,23E+06	1,23E+06
18	Cumeno	3,95E+05	3,95E+05	1,60E+05	1,60E+05

i	Produtos	Fi (tonelada/ano)	Si (tonelada/ano)	Di (tonelada/ano)	Qi (tonelada/ano)
19	Diisocianato de Difenilmetano (MDI)	.	.	1,70E+05	1,70E+05
20	EPDM (Etileno-Propileno-Dieno Monômero)/EPM (Etileno-Propileno Monômero)	.	.	2,20E+04	2,20E+04
21	Estireno	6,47E+05	6,47E+05	6,33E+05	6,33E+05
22	Etano	1,79E+06	1,79E+06	.	.
23	Etanolaminas	3,28E+06	3,28E+06	8,37E+04	8,37E+04
24	Eteno	.	.	3,11E+06	3,11E+06
25	Etilbenzeno	7,95E+05	7,95E+05	5,40E+05	5,40E+05
26	Etilenoglicol	.	.	4,46E+05	4,46E+05
27	Fenol	.	.	9,75E+04	9,75E+04
28	Formaldeído	5,08E+05	5,08E+05	4,81E+05	4,81E+05
29	Ftalatos	.	.	7,18E+04	7,18E+04
30	Gás Natural	1,38E+07	1,38E+07	.	2,27E+06
31	LAB/LAS (Alquilbenzeno Linear)	6,51E+03	6,51E+03	6,51E+03	6,51E+03
32	Metacrilato de Etila	2,96E+04	2,96E+04	2,96E+04	2,96E+04
33	Metacrilato de Metila	2,26E+04	2,26E+04	2,26E+04	2,26E+04
34	Metanol	3,76E+05	3,76E+05	8,84E+05	8,84E+05
35	m-Xileno	1,14E+05	1,14E+05	2,20E+04	2,20E+04
36	Nafta	6,74E+06	6,74E+06	.	.
37	n-Butano	5,00E+05	5,00E+05	.	.
38	n-Butanol	.	.	1,23E+05	1,23E+05
39	Nitrato de Amônio	1,76E+06	1,76E+06	1,94E+06	1,94E+06
40	Óxido de Eteno	.	.	2,61E+05	2,61E+05
41	Óxido de Propeno	.	.	1,32E+05	1,32E+05
42	o-Xileno	.	.	7,63E+04	7,63E+04
43	Polibutadieno (PB)	6,36E+04	6,36E+04	6,36E+04	6,36E+04
44	Policarbonato (PC)	2,19E+03	2,19E+03	4,72E+04	4,72E+04
45	Policloreto de Vinila (PVC)	4,06E+05	4,06E+05	9,43E+05	9,43E+05
46	Poliestireno (PS)	3,73E+05	3,73E+05	3,73E+05	3,73E+05
47	Polietileno (HDPE e LDPE)	.	.	2,13E+06	3,45E+06
48	Polietilenoglicol	.	.	6,50E+03	6,50E+03
49	Polietilenotereftalato (PET)	.	.	5,22E+05	5,85E+05
50	Polipropileno (PP)	1,39E+06	1,39E+06	1,39E+06	1,39E+06
51	Polipropilenoglicol	.	.	6,64E+03	6,64E+03
52	Propano	2,10E+07	2,10E+07	.	9,88E+06

i	Produtos	Fi (tonelada/ano)	Si (tonelada/ano)	Di (tonelada/ano)	Qi (tonelada/ano)
53	Propeno	5,87E+05	5,87E+05	2,04E+06	2,04E+06
54	Propilenoglicol	.	.	3,46E+04	3,46E+04
55	p-Xileno	1,63E+04	1,63E+04	1,96E+04	1,96E+04
56	SBR (Borracha de Butadieno Estireno)	.	.	6,18E+04	6,18E+04
57	Soda	1,35E+06	1,35E+06	2,51E+06	3,00E+06
58	Sulfato de Amônio	2,08E+06	2,08E+06	2,33E+06	2,33E+06
59	Tolueno	2,05E+05	2,05E+05	.	.
60	Uréia	9,50E+05	9,50E+05	4,51E+06	4,51E+06

A análise da Tabela IV.9 apresenta muitas diferenças com relação a Tabela IV.1, agora, o modelo não exclui nenhum petroquímico da rede ótima. Entretanto, mais petroquímicos são fornecidos à indústria, ou seja, não somente as matérias-primas básicas são fornecidas a este segmento. Isto se deve a técnica utilizada para remoção das inviabilidades, desta vez aplicada sobre as restrições de fornecimento.

É possível perceber que, desta vez, os intermediários estão sendo fornecidos à rede ótima, assim, os polímeros estão sendo produzidos dentro da petroquímica. Para os casos que existe uma entrada de produtos finais na rede ótima, como o polipropileno e poliestireno, por exemplo, é possível perceber que isto é devido a incapacidade de produção a um custo competitivo com a importação. Estes casos são identificados quando as variáveis Q_i e F_i apresentam valores iguais, pois para um produto final, que não é utilizado como intermediário em nenhuma rota, Q_i deve ser maior ou igual que F_i, respeitando a restrição de balanço de massa. Para o polímero SBR, a entrada de seus intermediários na rede petroquímica torna viável sua produção dentro da rede, diferentemente do que ocorre para polipropileno e poliestireno.

Tabela IV.10 – Resultados de quantidade produzida pelos processos *j* (X_j) na rede petroquímica - Alterações no fornecimento.

i	Produtos	Xj (tonelada/ano)	Bj (tonelada/ano)
1	1,2-Dicloroetano via cloração de etileno	1,08E+06	1,08E+06
2	2 – Etilhexanol via processo OXO	1,01E+05	1,01E+05
3	Acetona via oxidação do propileno	1,46E+04	1,19E+05
4	Ácido adípico via oxidação do ciclohexanol com ácido nítrico	3,76E+04	8,70E+04
5	Ácido nítrico, 95%, via amônia	6,62E+05	6,62E+05
6	Ácido sulfúrico via processo de absorção dupla	7,41E+06	8,21E+06
7	Ácido tereftálico, bruto, via p-xileno	2,50E+05	2,50E+05

i	Produtos	Xj (tonelada/ano)	Bj (tonelada/ano)
8	Acrilonitrila via amoxidação do propileno	.	1,00E+05
9	Amônia via reforma do gás natural	1,59E+06	1,59E+06
10	Amônia via reforma de nafta	1,59E+06	1,59E+06
11	Anidrido ftálico a partir de o-xileno	1,52E+05	1,52E+05
12	Anidrido maleico via oxidação de benzeno	.	3,00E+04
13	Benzeno via desproporcionação do tolueno	.	9,99E+05
14	Benzeno via hidrodealquilação do tolueno	1,71E+05	9,99E+05
15	Bisfenol A via reação de fenol e acetona	2,80E+04	2,80E+04
16	Butadieno via desidrogenação do n-butano	2,63E+05	4,66E+05
17	Caprolactama via fenol	5,60E+04	5,60E+04
18	Cumeno via benzeno e propeno	.	3,20E+05
19	Cloreto de vinila a partir de etileno	8,43E+05	8,43E+05
20	Cloreto de vinila via 1,2-Dicloroetileno	4,10E+05	8,43E+05
21	Cloro via eletrólise de cloreto de sódio	1,52E+06	1,52E+06
22	Diisocianato de Difenilmetano (MDI) via anilina e fosgênio	1,70E+05	1,90E+05
23	Estireno via etilbenzeno (desidrogenação)	.	5,40E+05
24	Estireno via etilbenzeno (processo hidroperóxido)	.	3,95E+06
25	Etileno via craqueamento de etano-propano (50-50 %m)	1,95E+06	3,95E+06
26	Etileno via craqueamento de nafta (alta severidade)	1,58E+06	3,95E+06
27	Etileno via pirólise de etano	.	3,95E+06
28	Etileno via pirólise de propano	3,95E+06	3,95E+06
29	Etilbenzeno via alquilação do benzeno	.	7,70E+05
30	Etilenoglicol via hidratação de óxido de etileno	1,56E+05	5,00E+05
31	Etilenoglicol via oxidação de etileno	5,00E+05	5,00E+05
32	Fenol via oxidação do cumeno	1,74E+05	1,96E+05
33	Fenol via sulfonação do benzeno	.	1,96E+05
34	Formaldeído via oxidação do metanol	.	7,88E+05
35	Metacrilato de metila a partir de acetona	.	1,00E+05
36	Metacrilato de etila a partir de acetona	.	5,00E+04
37	Produção de Etanolaminas	1,43E+05	1,43E+05
38	Ftalatos a partir de n-butanol	7,18E+04	2,66E+05
39	Nitrato de amônio via ácido nítrico e amônia	1,78E+05	5,73E+05
40	Metanol via gás natural (metano)	3,10E+05	3,10E+05
41	1-Butanol via propileno utilizando catalisador de cobalto-fosfina	.	1,50E+05
42	1-Butanol via propileno utilizando catalisador de ródio	1,32E+05	1,50E+05
43	Óxido de etileno via oxidação de etileno (ar)	.	5,00E+05
44	Óxido de etileno via oxidação de etileno (oxigênio)	4,64E+05	5,00E+05
45	Óxido de propileno via oxidação de propileno	1,70E+05	2,35E+05
46	Propilenoglicol via hidratação de óxido de propileno	3,50E+04	8,60E+04
47	p - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	3,26E+03	2,03E+05
48	p - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	.	2,03E+05
49	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	.	1,26E+05
50	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	7,63E+04	1,26E+05

i	Produtos	Xj (tonelada/ano)	Bj (tonelada/ano)
51	Uréia via processo de reciclo total	1,78E+06	1,78E+06
52	Uréia via amônia e dióxido de carbono	1,78E+06	1,78E+06
53	LAB/LAS	.	1,00E+04
54	SBR via polimerização por emulsão a frio	6,18E+04	1,08E+05
55	SBR via polimerização por solução	.	1,08E+05
56	SBR via polimerização por emulsão a quente	.	1,08E+05
57	EPDM via polimerização em solução	.	4,20E+04
58	EPDM via polimerização em suspensão	2,20E+04	4,20E+04
59	PB via catalisador de cobalto	.	1,43E+04
60	PB via catalisador de Ziegler-Natta com iodo	.	1,43E+04
61	PB via catalisador de níquel	.	1,43E+04
62	PC via fosgenação em solução contínua	1,50E+04	1,50E+04
63	PC via fosgenação interfacial	1,50E+04	1,50E+04
64	PC via fosgenação em batelada	1,50E+04	1,50E+04
65	PVC via polimerização em massa	5,36E+05	7,29E+05
66	PVC via polimerização em suspensão	.	7,29E+05
67	PVC via polimerização em emulsão	.	7,29E+05
68	PVC via polimerização em emulsão (em batelada)	.	7,29E+05
69	PS via polimerização em massa	.	5,86E+05
70	PS via polimerização em suspensão	.	5,86E+05
71	PS via polimerização em massa/suspensão	.	5,86E+05
72	PE HD via tecnologia Union Carbide	.	3,04E+06
73	PE HD via tecnologia HOECHST	.	3,04E+06
74	PE HD via tecnologia Stamicarbon	.	3,04E+06
75	PE HD via tecnologia Montedison	.	3,04E+06
76	PE LD via reação em autoclave	3,04E+06	3,04E+06
77	PE LD via reação em autoclave de mistura	4,18E+05	3,04E+06
78	PE LD em reator tubular	.	3,04E+06
79	Polietilenoglicol a partir de óxido de eteno	6,50E+03	1,00E+04
80	PET a partir de DMT e etilenoglicol	5,85E+05	5,85E+05
81	PET a partir de ácido tereftálico e etilenoglicol	.	5,85E+05
82	Polipropilenoglicol a partir de óxido de propeno	6,64E+03	1,00E+04
83	PP via processo em fase líquida	.	1,97E+06
84	PP via processo em fase vapor	.	1,97E+06
85	PP via processo em lama	.	1,97E+06
86	PP via processo em solução	.	1,97E+06

Os resultados apresentados na Tabela IV.10 mostram as rotas tecnológicas que compõem a superestrutura ótima proposta, bem como sua produção e limite superior (capacidade instalada). Os custos anuais considerando as equações II.1 e II.2 foram, respectivamente, R$92.750.000.000,00 e R$81.580.000.000,00. Diferença compreensível, devido às diferenças entre os modelos apresentados nas equações II.1 e II.2.

Os resultados apresentados na Tabela IV.2 reiteram as observações acerca do custo de algumas rotas tecnológicas não possuírem viabilidade econômica quando comparado ao preço gasto para importação do produto principal produzido. É possível notar que isto ocorre para os polímeros polipropileno, poliestireno e polibutadieno. Ainda que o estireno esteja entrando na rede petroquímica em quantidade maior do que a demandada pelo mercado, a produção de poliestireno não é viável economicamente e este excesso de estireno é consumido em outras rotas tecnológicas.

Mais uma vez, as etanolaminas não são utilizadas na produção de LAB e, tal como ocorre para alguns polímeros, este produto é importado para atender a demanda nacional. Note que, desta vez, as etanolaminas são produzidas, porém, sua capacidade instalada não é suficiente para atender à demanda interna e externa da rede petroquímica. Portanto, além de ser produzido, este produto também é importado.

IV.4 – Análises de sensibilidade da indústria petroquímica (com flexibilização das restrições de fornecimento)

Os estudos de caso realizados para o modelo otimizado via alteração das restrições de demanda são apresentados novamente a seguir, porém, aplicando a técnica de otimização nas restrições de fornecimento. A primeira análise de sensibilidade foi realizada com base em alterações no valor da energia elétrica, parcela importante no custo dos processos de produção, visto que os gastos com utilidades também foram estimados através da tarifa energética.

Tabela IV.11 – Comparativo entre os custos anuais com a variação no preço da energia elétrica - Alterações no fornecimento.

Variação do parâmetro P_i	$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j^* X_j - \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(H_i)$	$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j X_j + \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(P_i - H_i)$
Problema original (R$/ano)	R$ 81.580.000.000,00	R$ 92.750.000.000,00
Eletricidade (-20%)	11,47%	10,08%
Eletricidade (-10%)	5,74%	5,05%
Eletricidade (+10%)	-5,74%	-5,05%
Eletricidade (+20%)	-11,47%	-10,09%

Diferentemente do esperado, o aumento do preço da energia elétrica acarreta em menores gastos para o setor, consequentemente, uma maior tarifa sobre a energia elétrica está associada a um custo anual maior. Isto se deve principalmente ao fato de que, ao contrário da

primeira modelagem, esta nova abordagem apresenta um excesso de gás natural ($Q_i > 0$), já que a demanda para as matérias-primas principais foi considerada nula, para garantir a máxima utilização destes recursos dentro da rede ótima.

A partir deste excesso e devido ao fato do potencial para geração de energia através da queima do gás natural gerar um valor maior do que sua venda, o abatimento financeiro é tão maior quanto maior for a tarifa enegética. Logo, com o aumento da tarifa, o abatimento é maior e portanto o custo anual é menor, conforme mostra a Tabela IV.11.

Como nenhuma das outras variáveis sofreram alteração, não foi possível verificar a reorganização da superestrutura a partir de novas rotas tecnológicas devido às variações no valor da energia elétrica, conforme apresentado em Rudd *et al.* (1981). Isto é devido ao fato de que as alterações não tornaram nenhum processo mais vantajoso economicamente do que os participantes da rede petroquímica ótima obtida.

Na Tabela IV.12, são apresentados os custos anuais considerando variações de -20%, -10%, 10% e 20% no preço de compra das principais matérias-primas, nafta, gás natural, etano e propano.

Tabela IV.12 – Comparativo entre os custos anuais com a variação no preço das principais matérias-primas - Alterações no fornecimento.

Variação do parâmetro P_i	$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j^* X_j - \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(H_i)$	$Custo\ de\ produção = \sum_{i=1}^{N} P_i F_i + \sum_{j=1}^{M} C_j X_j + \sum_{i=1}^{N} (Q_i - D_i)(P_i - H_i)$
Problema original (R$/ano)	R$ 81.580.000.000,00	R$ 92.750.000.000,00
Etano+Propano (-20%)	-3,32%	-4,19%
Etano+Propano (-10%)	-1,67%	-2,10%
Etano+Propano (+10%)	1,65%	2,10%
Etano+Propano (+20%)	3,32%	4,20%
Gás Natural (-20%)	-2,05%	-2,09%
Gás Natural (-10%)	-1,03%	-1,05%
Gás Natural (+10%)	1,02%	1,05%
Gás Natural (+20%)	2,05%	2,10%
Nafta (-20%)	-2,55%	-2,24%
Nafta (-10%)	-1,27%	-1,12%
Nafta (+10%)	1,27%	1,12%
Nafta (+20%)	2,55%	2,24%

A partir da Tabela IV.12, percebe-se maior fragilidade do setor petroquímico diante do preço da nafta e do conjunto etano e propano. Assim como verificado na análise da Tabela IV.4, o preço do gás natural é o menos influente no custo anual. Entretanto, era esperado que o preço da nafta fosse o mais influente diante da grande dependência por este petroquímico básico, um dos gargalos da indústria petroquímica no Brasil.

Pela análise da Tabela IV.12 percebe-se que a modelagem alternativa, onde a técnica de otimização modificou as restrições de fornecimento para viabilizar o problema, a influência da nafta foi minimizada, principalmente devido à importação de intermediários e produtos finais em detrimento da utilização das rotas tecnológicas consideradas na superestrutura. Como foi verificado para alguns polímeros, a importação é financeiramente mais vantajosa do que a produção, diminuindo a influência das matérias-primas básicas utilizadas na produção destes petroquímicos importados no custo anual do setor.

Comparando os resultados da Tabela IV.12 com a Tabela IV.11, é possível notar que devido ao excesso de gás natural, utilizado para geração de energia (abatimento no custo anual), variações no preço da energia são mais influentes no custo anual do setor do que flutuações nos preços das matérias-primas básicas.

A Tabela IV.13 apresenta as alterações com relação aos resultados do modelo após flutuações no fornecimento proposto originalmente.

Tabela IV.13 – Variáveis e parâmetros alterados a partir de cortes no fornecimento da nafta - Alterações no fornecimento.

		0% de Nafta		25% de Nafta		50% de Nafta		100% de Nafta	
i	Produtos	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)
17	Cloro	.	.	2,78E+03	2,78E+03	2,24E+05	2,24E+05	2,24E+05	2,24E+05
36	Nafta	.	.	1,69E+06	1,69E+06	3,37E+06	3,37E+06	6,74E+06	6,74E+06
45	Policloreto de Vinila (PVC)	7,63E+05	7,63E+05	7,59E+05	7,59E+05	4,06E+05	4,06E+05	4,06E+05	4,06E+05
53	Propeno	1,58E+06	1,58E+06	1,57E+06	1,57E+06	1,24E+06	1,24E+06	5,87E+05	5,87E+05
i	Produtos	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)
47	Polietileno (HDPE e LDPE)	2,13E+06	2,13E+06	2,13E+06	2,13E+06	2,13E+06	2,45E+06	2,13E+06	3,45E+06

Diante do apresentado, apenas a produção de polietileno é afetada, entretanto, a demanda não é comprometida. Além disso, para atender a demanda, não é necessário importar polietileno. Diante da diminuição no fornecimento da nafta, percebe-se uma diminuição no fornecimento de cloro e um aumento no fornecimento de PVC e propeno.

O aumento do fornecimento indica que nenhuma rota tecnológica alternativa ao uso da nafta como matéria-prima substitui a importação destes petroquímicos. Por outro lado, a diminuição do fornecimento de cloro sem afetar sua demanda, indica que este produto é substituído por outro como intermediário em um ou mais processos que utilizam outra matéria-prima em substituição a nafta.

Tabela IV.14 – Alterações nos processos de produção a partir de cortes no fornecimento da nafta - Alterações no fornecimento.

		0% de Nafta		25% de Nafta		50% de Nafta		100% de Nafta	
j	Processos	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)
10	Amônia via reforma de nafta	.	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06	1,59E+06
19	Cloreto de vinila a partir de etileno	4,75E+05	8,43E+05	4,80E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05	8,43E+05
26	Etileno via craqueamento de nafta (alta severidade)	.	3,95E+06	2,00E+04	3,95E+06	5,39E+05	3,95E+06	1,58E+06	3,95E+06
49	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Aromax-Isolene)	7,63E+04	1,26E+05	.	1,26E+05	.	1,26E+05	.	1,26E+05
50	o - Xileno via isomerização de m-xileno (Parex-Isomar)	.	1,26E+05	7,63E+04	1,26E+05	7,63E+04	1,26E+05	7,63E+04	1,26E+05
65	PVC via polimerização em massa	.	7,29E+05	1,83E+05	7,29E+05	5,36E+05	7,29E+05	5,36E+05	7,29E+05
66	PVC via polimerização em suspensão	1,79E+05	7,29E+05	.	7,29E+05	.	7,29E+05	.	7,29E+05
72	PE HD via tecnologia Union Carbide	2,13E+06	3,04E+06	2,13E+06	3,04E+06	2,13E+06	3,04E+06	.	3,04E+06
76	PE LD via reação em autoclave	.	3,04E+06	.	3,04E+06	.	3,04E+06	3,04E+06	3,04E+06
77	PE LD via reação em autoclave de mistura	.	3,04E+06	.	3,04E+06	.	3,04E+06	4,18E+05	3,04E+06

A análise quanto aos processos de produção mediante cortes no fornecimento indica que os processos dependentes da nafta têm sua produção decrescendo quanto maior o corte no fornecimento. Também é possível notar que os polímeros PVC e PE, além do o-xileno, possuem suas rotas de produção alteradas à medida que a escassez da nafta aumenta.

Tabela IV.15 – Variáveis e parâmetros alterados a partir de cortes no fornecimento de gás natural - Alterações no fornecimento.

		0% de GN		25% de GN		50% de GN		100% de GN	
i	Produtos	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)	Fi (ton/ano)	Si (ton/ano)
6	Ácido Sulfúrico	7,41E+06	7,41E+06	5,98E+06	5,98E+06	3,43E+06	3,43E+06	.	.
23	Etanolaminas	.	.	5,83E+05	5,83E+05	1,73E+06	1,73E+06	3,28E+06	3,28E+06
30	Gás Natural	1,46E+06	1,46E+06	3,45E+06	3,45E+06	6,90E+06	6,90E+06	1,38E+07	1,38E+07
38	n-Butanol	1,32E+05	1,32E+05	.	.	.	.	.	.
i	Produtos	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)	Di (ton/ano)	Qi (ton/ano)
30	Gás Natural	.	.	.	.	.	.	.	2,27E+06

A Tabela IV.15 mostra que a tentativa de zerar o valor de S_i para o gás natural é desrespeitada pela técnica de otimização que considera, no pior dos casos, o fornecimento de 10% do fornecido na simulação original. A produção de etanolaminas quando o fornecimento de gás natural é mínimo se anula, uma vez que o processo de produção de H_2S depende do tratamento do gás natural utilizando etanolaminas, assim, quando o fornecimento de gás é

mínimo, todo H_2S é importado e, portanto, toda produção de etanolaminas passa a ser direcionada ao mercado.

A Tabela IV.16 mostra uma diminuição na produção de etanolaminas, visto que não há mais necessidade de atender ao processo de produção de ácido sulfúrico. É possível notar pela análise das Tabelas IV.15 e IV.16 que os petroquímicos n-butanol e ácido sulfúrico se tornam produtos de importação quando o fornecimento atinge o mínimo. Porém, diferentemente do H_2S, o n-butanol só tem sua produção zerada no ponto em que o fornecimento de matéria-prima atinge ao mínimo.

Tabela IV.16 – Alterações nos processos de produção a partir de cortes no fornecimento de gás natural - Alterações no fornecimento.

		0% de GN		25% de GN		50% de GN		100% de GN	
j	Processos	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)	Xj (ton/ano)	Bj (ton/ano)
6	Ácido sulfúrico via processo de absorção dupla	.	8,21E+06	1,43E+06	8,21E+06	3,98E+06	8,21E+06	7,41E+06	8,21E+06
37	Produção de Etanolaminas	8,37E+04	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05	1,43E+05
42	1-Butanol via propileno utilizando catalisador de ródio	.	1,50E+05	1,32E+05	1,50E+05	1,32E+05	1,50E+05	1,32E+05	1,50E+05

É importante ressaltar que nos estudos de caso onde há variação do fornecimento de matérias-primas, o custo anual não é o melhor critério de análise. Neste caso, os casos extremos indicam uma indústria cada vez mais dependente da importação, em vez de uma diminuição na superestrutura ótima, como ocorre com os modelos cuja técnica de otimização é aplicada sobre as restrições de demanda.

A comparação entre os estudos de caso onde somente o custo anual foi alterado indica o preço da energia elétrica como sendo o parâmetro mais influente sobre o custo anual. Isto devido ao abatimento pela geração de energia elétrica através da queima do excedente de gás natural.

É natural que a segunda modelagem apresente alguns excessos propositais para redução do custo anual, por exemplo excesso de gás natural. Estes excessos podem ser utilizados no abatimento através da geração de energia, no caso do gás natural, este abatimento é bastante representativo devido à alta capacidade de geração de energia elétrica pela combustão. Desta forma, a segunda modelagem não seria a mais indicada para avaliação dos gargalos, embora

apresente uma superestrutura mais próxima da petroquímica brasileira devido a presença de diversos produtos importados.

As análises não apresentaram exatamente os mesmo resultados, isto devido a técnica de otimização aplicada em restrições diferentes. Por um lado, para avaliação dos gargalos da indústria petroquímica, a primeira modelagem com modificações nas restrições de demanda é mais adequada, uma vez que permite a avaliação de quais produtos deixariam de ser produzidos através da diminuição da rede. Por outro lado, a segunda modelagem é mais indicada para avaliação de quais produtos são majoritariamente importados e resulta em uma rede mais parecida com a indústria real, baseada na importação de intermediários e produtos finais.

CAPÍTULO V – CONCLUSÕES

Neste trabalho apresentou-se um modelo da indústria petroquímica brasileira como uma rede interligada de produtos e processos químicos, como continuação do trabalho de Loução Jr. (2015). Para que o problema de otimização (minimização do custo anual da indústria petroquímica brasileira) tivesse um ponto ótimo viável, foi necessário utilizar uma técnica de remoção de inviabilidades para resolução do problema com o GAMS.

Diante do fato de que há alteração nos limites de demanda para tornar o problema viável, é esperado que haja diferença nos produtos que compõem a indústria petroquímica. Isto porque para o modelo ser viável, alguns produtos foram excluídos da rede petroquímica ou deixaram de ser comercializados para fora do setor (consumidor final ou outros segmentos da indústria), significando que todo o volume produzido é usado internamente pela rede e não há demanda externa (D_i).

Como exemplo, é possível citar a acrilonitrila e o estireno, que deixariam de ser produzidos, uma vez que suas demandas foram anuladas. Neste caso, os produtos foram excluídos da rede petroquímica ótima. Exemplificando a segunda situação, o cumeno e as etanolaminas que, apesar de possuírem demanda nula, estariam sendo produzidos por seus respectivos processos de produção, mas estariam sendo consumidos exclusivamente dentro da superestrutura otimizada.

Quando os limites de fornecimento são relaxados para viabilizar o modelo, observa-se que, em vez de diminuir a rede ótima, o problema sugere a importação dos petroquímicos para atender a demanda externa. Isto quer dizer que não há a exclusão do produto da estrutura petroquímica. Enquanto na primeira modelagem (relaxação a partir da demanda), o estireno está fora da rede ótima, nesta simulação o estireno é visto como um intermediário exclusivamente importado para atender à própria rede e ao mercado interno.

Quanto à comparação entre as duas possibilidades para a função objetivo (função custo anual), percebe-se que os resultados diferem exclusivamente no que se refere ao custo anual da indústria petroquímica. Matematicamente, nota-se que a Equação II.1 apresenta no terceiro termo o multiplicador ($P_i - H_i$), enquanto a Equação II.2 apresenta o termo ($-H_i$), isto é, a

terceira parcela da Equação II.2 é mais negativa, tornando o custo anual menor. Neste caso, não importa quais os limites manipulados para viabilizar o problema, a conclusão é a mesma.

Em termos matemáticos, isso representa uma vantagem econômica. Contudo, ao considerar a queima de todo excedente em vez do custo de oportunidade, a função objetivo da Equação II.2 também considera limitado o crescimento da indústria petroquímica analisada. Por esta razão, a Equação II.2 é mais utilizada para análises em países menos desenvolvidos. Assim, uma indústria como a brasileira, que nitidamente não está nem próxima da estrutura ótima, tanto em termos de demanda de mercado quanto de capacidade de produção, levaria um tempo maior ainda para apresentar crescimento.

As análises dos resultados quanto aos cortes no fornecimento de gás natural e nafta mostraram para a primeira modelagem que, ao restringir o fornecimento, a rede se reestrutura e forma uma nova superestrutura otimizada, com parâmetros de demanda diferentes, e consequente diminuição do número de petroquímicos integrantes da rede ótima.

Quando apenas o fornecimento da nafta é alterado, percebe-se que não há outro petroquímico que seja capaz de substituir a escassez de nafta sem alterar a rede. Com relação aos produtos, a amônia é a que possui maior sensibilidade à escassez de nafta, uma vez que, quando não há nafta disponível, sua demanda é nula, bem como sua produção via processo de reforma de nafta. Ou seja, o que é produzido através da reforma do gás natural atende apenas à própria rede.

Com relação às variações no fornecimento de gás natural, nota-se que a indústria petroquímica aumenta a quantidade de soda que entra na rede para minimizar o impacto da escassez de gás. A demanda por etanolaminas deixa de ser nula quando o fornecimento de gás natural é nulo, pois o processo de produção de H_2S depende do tratamento do gás natural utilizando as etanolaminas. Assim, quando não há gás, toda a produção de etanolaminas é direcionada ao mercado, entrando na rede como produto final.

Na segunda modelagem, quando há uma escassez de nafta, apenas a produção de polietileno é afetada, entretanto, a demanda não é comprometida. Também é possível notar uma diminuição no fornecimento de cloro e um aumento no fornecimento de PVC e propeno. Nestes casos, o aumento do fornecimento indica que nenhuma rota tecnológica alternativa ao uso da

nafta como matéria-prima está sendo considerada. A diminuição do fornecimento de cloro sem afetar sua demanda, indica que este produto deixa de ser consumido em alguma rota substituída ou é produzido como subproduto em algum processo que entrou na estrutura ótima. Neste caso, como a produção de cloreto de vinila diminui bastante, uma quantidade maior de cloro fica disponível para o mercado na rede ótima.

Quanto à variação no fornecimento de gás natural, observa-se que a tentativa de anular o valor de S_i para o gás natural é desrespeitada pelo algoritmo de correção da inviabilidades, no pior dos casos, o modelo considera o fornecimento em 10% do valor apresentado na simulação original. A importação de etanolaminas quando o fornecimento de gás natural é mínimo se anula, uma vez que o processo de produção de H_2S depende do tratamento do gás natural utilizando etanolaminas. Assim, quando o fornecimento de gás é mínimo, todo o H_2S é importado e toda produção de etanolaminas é direcionada ao mercado. Também é possível notar uma diminuição na produção de etanolaminas, visto que não há mais necessidade de atender ao processo de produção de ácido sulfúrico.

As variações nos preços de maneira geral causaram impacto apenas no custo final da petroquímica nacional, diferentemente dos resultados das análises feitas por Rudd *et al.* (1981), em que variações nos preços de matérias-primas e da energia indicavam principalmente a mudança de processo de produção, tornando uma rota tecnológica preferível à outra. Neste modelo, devido ao número baixo de processos alternativos explorados e, principalmente, ao estado de maturidade deste setor no Brasil, os resultados influenciam exclusivamente o custo anual.

A modelagem baseada na relaxação da demanda apresentou resultados mais pertinentes com relação às variações no custo anual da indústria petroquímica. Em se tratando de sensibilidade, o preço da nafta e da energia elétrica são os principais gargalos da indústria petroquímica brasileira. Entretanto, as variações do custo com relação ao preço da nafta ainda apresentam valores percentuais relativamente maiores do que as variações pela tarifa da energia.

Na segunda modelagem, a comparação entre os estudos de caso onde somente o custo anual foi alterado indica o preço da energia elétrica como sendo o parâmetro mais influente sobre o custo anual. Isto é devido ao abatimento pela geração de energia elétrica através da

queima do excedente de gás natural. A partir deste excesso e devido ao potencial para geração de energia através da queima do gás natural, o abatimento financeiro é tão maior quanto maior for a tarifa enegética. Logo, com o aumento da tarifa, o abatimento é maior e portanto o custo anual é menor. Este resultado não reflete bem a influência da tarifa energética no custo anual, pois queimar todo petroquímico excedente não representa a realidade da indústria brasileira. Quanto às matérias-primas, as mais influentes no custo anual foram o conjunto etano e propano e a nafta, respectivamente.

Embora as análises não tenham apresentado os mesmos resultados com relação aos estudos de caso, os resultados descreveram bem a indústria petroquímica nacional, cada modelagem com sua particularidade devido à relaxação adotada. Enquanto para avaliação dos gargalos da indústria petroquímica, a primeira modelagem com flexibilização das restrições de demanda parece ser a mais adequada, a segunda modelagem é a mais indicada para avaliação de quais produtos são majoritariamente importados em uma superestrutura ótima.

Para exemplificar as decisões que podem ser tomadas com base nos resultados da modelagem, é possível sugerir o investimento em alguns pontos estratégicos do setor petroquímico. Diante dos resultados encontrados percebe-se que a produção de poliestireno é limitada pelo fornecimento de estireno, assim, investimentos na produção de estireno poliestireno são necessários para diminuir a dependência externa por intermediários e produtos finais e maximizar o lucro do setor. Comparando com os dados do anuário da ABIQUIM (ABIQUIM, 2012), é possível concluir que, os investimentos devem ser mais voltados à produção de estireno. Isto se deve ao grande volume na importação deste intermediário quando comparado à sua produção. Outras possibilidades de investimento no setor podem ser observadas com base nos resultados das simulações, de modo que é importante diminuir a dependência (diminuir os volumes das importações) por petroquímicos importados para maximizar os lucros do setor e torná-lo mais integrado.

Logo, conclui-se que este modelo foi adequado para a análise da indústria petroquímica brasileira como uma superestrutura interligada, desde que se utilizem técnicas de remoção de inviabilidades. Espera-se que estimativas mais precisas dos parâmetros envolvidos no modelo, bem como a adoção de outras hipóteses (por exemplo, o reconhecimento de que certos produtos devem ser importados ao invés de produzidos exclusivamente no Brasil) tornem o modelo mais coerente, de forma que a remoção de inviabilidades não seja necessária.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABIQUIM. **Anuário da Indústria Química Brasileira**. ABIQUIM- Associação Brasileira da Indústria Química, São Paulo, Dez. 2012.

ABIQUIM. **Anuário da Indústria Química Brasileira**. ABIQUIM- Associação Brasileira da Indústria Química, São Paulo, Dez. 2014.

ACINH. Disponível em: <http://www.acinh.com.br/servicos/cotacao-dolar> (Acessado em 19/05/2014 às 16:00h)

AL-FADLI, A.M.; SOLIMAN, M.A.; WAGIALLA, K.M.; AL-MUTAZ, I.S. **A Network Model for the Optimal Planning of the Saudi Petrochemical Industry**. J. Eng. Sci., King Saud Univ., v. 14, no. 2, p. 295 – 309, 1988.

AL-QAHTANI, K.; ELKAMEL, A.; PONNAMBALAM, K. **Robust Optimization for Petrochemical Network Design under Uncertainty**. Ind. Eng. Chem. Res., v. 47, p. 3912 – 3919, 2008.

AL-QAHTANI K. Y., ELKAMEL A., **Planning and Integration of Refinery and Petrochemical Operations**, 1° ed., Weinheim, Wiley-VCH, 2010.

AL-SHARRAH, G. K.; HANKINSON, G.; ELKAMEL, A. **Decision-Making for Petrochemical Planning Using Multiobjective and Strategic Tools**. Chem. Eng. Res. Des., v. 84, no. 11, p. 1019 – 1030, Nov. 2006.

AL-SHARRAH, G. K.; IMAD A.; ELKAMEL, A; ALPER E. **Planning an Integrated Petrochemical Industry with an Environmental Objective**. Ind. Eng. Chem. Res., no. 40, p. 2103– 2111, 2001.

AL-SHARRAH, G. K.; IMAD A.; ELKAMEL, A. **Planning an Integrated Petrochemical Business Portifolio for Long-Range Financial Stability**. Ind. Eng. Chem. Res., no. 41, p. 2798– 2804, 2002.

AL-SHARRAH, G. K.; IMAD A.; ELKAMEL, A. **Modeling and Identification of Economic Disturbances in the Planning of the Petrochemical Industry**. Ind. Eng. Chem. Res., no. 42, p. 4678– 4688, 2003

ALVES, F. C., BOMTEMPO, J. V., COUTINHO P. L. A. **Competências para inovar na petroquímica brasileira**. Revista Brasileira de Inovação, v. 4, no. 2, p. 301-327, 2005.

AURICH, M. R. C. **Um Modelo de fluxo de potência ótimo linear com reprogramação corretiva via Método de Pontos Interiores**. 126p. Tese (Mestrado em Engenharia Elétrica) – Universidade Estadual de Campinas. 2004.

BAIN & COMPANY. **Estudo do potencial de diversificação da indústria química brasileira**. São Paulo, 2014.

CHÁVEZ, O. E., RUDD, D. F., JIMÉNEZ, A. (1990). **Structural simulation in the analysis of the petrochemical industry. Computers Chemical Engineering**, v,15, p. 375-384, 1991.

ELEKEIROZ. Disponível em: <http://www.elekeiroz.com.br/PT/produtos/Documents/Manual%20Completo.pdf> (Acessado em 31/08/2014 às 20:15h)

EY. **Perspectivas para a indústria de petróleo e gás no Brasil**. EY – Ernst & Young, Rio de Janeiro, Jan. 2014. (Disponível em :http://www.ey.com/Publication/vwLUAssets/Perspectivas_Oleo_Gas_Brasil/$FILE/LR%20Estudo%20Centro%20de%20energia%2010_02_2014.pdf - Acessado em 06/01/2015 às 17:30h)

FATHI-AFSHAR, Saeed; YANG, Jing-Chang. **Designing the Optimal Structure of the Petrochemical Industry for Minimum Cost and Least Gross Toxicity of Chemical Production**. Chem. Eng. Sci., v. 40, no. 5, p. 781 – 791, 1985.

FATHI-AFSHAR, Saeed; MAISEL, Daniel S.; RUDD, Dale F.; TREVINO, Andres A.; YUAN, William W. **Advances in Petrochemical Technology Assessment**. Chem. Eng. Sci., v. 36, no. 9, p. 1487 –1511, 1981.

GAMS Development Corporation. Allsolvers.pdf.: **GAMS – The Solvers Manuals**. Washington, 2013.

GOMES, Gabriel L. **Análise da Integração Refino-Petroquímica – Oportunidades Econômicas, Estratégicas e Ambientais**. Tese (Doutorado em Ciências) – Planejamento Energético, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 2011.

GURKAN, T., KARTAL, N., (1989). **Model for the development of the Turkish petrochemical industry. Engineering Cost and Production Economics**, v,18, p. 145-157, 1989.

HIMMELBLAU, D. M.; EDGAR, T. F. **Optimization of Chemical Processes. New York**. McGraw-Hill, 1988.

JIMÉNEZ, A., RUDD, D. F., MEYER, R. R., (1981). **A study of the development of a Mexican petrochemical industry using mixed-integer programing**. Computers Chemical Engineering, v,6, p. 219-229, 1982.

JIMÉNEZ, A. G.; RUDD, D. F. **Use of a Recursive Mixed-Integer Programming Model to Detect an Optimal Integration Sequence for the Mexican Petrochemical Industry**. Comput. chem. Engng., v. 11, no. 3, p. 291 – 301, 1987.

LOUÇÃO JR., F. L. **Avaliação da Indústria Petroquímica no Brasil: Desenvolvimento de Modelo via Programação Matemática**. Projeto Final de Curso. ANP, Escola de Química/UFRJ, Rio de Janeiro, 2015.

MOREIRA, Fabrícia S. **A integração refino petroquímica como alternativa para o atendimento do crescente mercado de petroquímicos**. Tese (Mestrado em Ciências) – Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, 2008.

MIKKELSEN, J. Kr., RUDD, D. F., (1979). **Development of a norwegian petrochemical industry**. Engineering Cost and Production Economics, v,5, p. 163-177, 1981.

O GLOBO. Disponível em <http://g1.globo.com/economia/noticia/2014/02/energia-industrial-no-brasil-e-11-mais-cara-entre-28-paises-diz-firjan.html> (Acessado em 21/05/2014 às 11:20h)

OXITENO. Disponível em: <http://www.oxiteno.com.br/cms/media/26695/etanolaminas-leather-pt.pdf> (Acessado em 31/08/2014 às 20:00h)

PASSOS, E. J. P. F. **Programação Linear como instrumento da pesquisa operacional**. São Paulo: Editora Atlas, 2008.

PEREIRA, R. A. **Análise dos Principais Processos Críticos para Produção de Insumos Petroquímicos e sua Evolução Tecnológica**. Tese (Mestrado em Ciências) – Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, 2010.

PETROBRAS. **Análise Financeira e Demonstrações Contábeis 2011**. PETROBRAS – Petróleo Brasileiro S.A., Rio de Janeiro, Fev. 2012.

PETROBRAS. **Análise Financeira e Demonstrações Contábeis 2012**. PETROBRAS – Petróleo Brasileiro S.A., Rio de Janeiro, Mar. 2013.

RUDD, D. F., TREVIÑO, A. A., FATHI-AFSHAR, S., STADTHERR, M. A., **Petrochemical Technology Assessment**, 1° ed., New york, John Wiley & Sons, 1981.

SAHINIDIS, N.V.; GROSSMANN, I. E.; FORNARI, R.E.; CHATHRATHI, M. **Optimization Model for Long Range Planning in the Chemical Industry**. Computers chem. Engng, v. 13, no,9, p. 1049 –1063, 1989.

SANTIAGO, M.; IGLESIAS, O. A.; PANIAGUA, C.N. **Optimal Technology Path for Chemical Industry Production**. Computers & Chemical Engineering, v. 10, no,5, p. 421 – 431, 1986.

SILVA, J. C., SILVA, R. M., **Uma abordagem de modelagem matemática via programação linear**, In: IV SIMPÓSIO DE MATEMÁTICA E MATEMÁTICA INDUSTRIAL, 4, 2012 Catalão, Anais Catalão, Universidade Federal de Goiás 2012,
p. 129-143.

STADTHERR, M. A., RUDD, D. F. (1975). **Systems study of the petrochemical industry**. Chemical Engineering ScienceI, v,31, p. 1019-1028, 1976.

TOLEDO, Carlos E. E.; ARANDA, Claudia G.; MARESCHAL, Bertrand. **Petrochemical Industry: Assessment and Planning Using Multicriteria Decision Aid Methods**. Technology and Investment, v. 1, no,2, p. 118 –134, 2010.

VAN DEN HEEVER, Susara A.; GROSSMANN, Ignacio E. **Disjunctive Multiperiod Optimization Methods for Design and Planning of Chemical Process Systems**. Computers and Chemical Engineering, v,23, p. 1075 – 1095, 1999.

WEC. **Energy Efficiency Policies around the World: Review and Evaluation**. World Energy Council, London, Dez. 2007.

APÊNDICE A – COEFICIENTES TÉCNICOS UTILIZADOS NA MODELAGEM

Tabela A.1 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 1-6.

a_{ij}	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	1,00														
2		1,00													
3			1,00												-0,28
4				1,00											
5				-0,73	1,00										
6						1,00									
7							1,00								
8								1,00							
9					-0,28			-0,43	1,00	1,00					
10											1,00				
11												1,00			
12												-1,19	1,00	1,00	-0,02
13															1,00
14															
15															
16															
17	-0,70														
18															
19															
20															
21															
22															
23						-0,45									
24	-0,36														
25															
26															
27															-0,89
28															
29															
30						-1,35			-0,70						
31															
32															

a_{ij}	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
33															
34															
35															
36										-1,02					
37															
38		0,11													
39															
40															
41															
42											-0,97				
43															
44															
45															
46															
47															
48															
49															
50															
51															
52															
53		-1,04	-0,85					-1,20							
54															
55							-0,68								
56															
57			-0,01												-0,01
58															
59													-2,69	-1,20	
60															

Tabela A.2 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 2-6.

a_{ij}	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
1					-1,66										
2															
3															
4															
5															

a_{ij}	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
6						-0,08									
7															
8															
9		-1,48													
10															
11															
12			-0,67					0,03						-0,74	
13															
14	1,00														
15		1,00													
16				1,00	1,00										
17				-0,61		1,00									
18			1,00												
19							1,00								
20															
21								1,00	1,00						
22										-0,92		-1,30			
23															
24				-0,48						1,00	1,00	1,00	1,00	-0,27	
25								-1,15	-1,14					1,00	
26															1,00
27		-0,92													
28							-0,16								
29															
30															
31															
32															
33															
34															
35															
36											-3,25				
37	-1,90														
38															
39															

a_{ij}	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
40															-0,87
41									0,41						
42															
43															
44															
45															
46															
47															
48															
49															
50															
51															
52										-0,92			-2,36		
53			-0,38						-0,33	0,14	0,63	0,04	0,24		
54															
55															
56															
57						1,12	-0,18		-0,01			-0,01			
58		4,40													
59								0,05							
60															

Tabela A.3 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 3-6.

a_{ij}	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
1														
2														
3		0,61			-0,68	-0,68								
4														
5									-0,80					
6					-1,63	-1,63								
7														
8														
9							-0,17		-0,22					
10								-0,56						
11														

a_{ij}	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
12			-0,94											
13														
14														
15														
16														
17														
18		-1,35												
19														
20														
21														
22														
23							1,00							
24														
25	-0,51													
26	1,00													
27		1,00	1,00											
28				1,00										
29								1,00						
30	-0,12									-0,92	-0,62	-0,51		
31														
32						1,00								
33					1,00									
34				-1,18	-0,37					1,00				
35														
36														
37														
38								-0,28			1,00	1,00		
39									1,00					
40							-0,43						1,00	1,00
41														
42														
43														
44														
45														
46														
47														
48														
49														

a_{ij}	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
50														
51														
52														
53											-0,74	-0,69	-0,96	-0,88
54														
55														
56														
57		-0,01	-1,64											
58														
59														
60														

Tabela A.4 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 4-6.

a_{ij}	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58
1														
2														
3														
4														
5														
6									-1,20	-0,02				
7														
8														
9							-0,57	-0,57						
10														
11														
12									-2,25					
13														
14										-0,73	-0,76	-0,56		
15														
16														
17														
18														
19														
20													1,00	1,00
21										-0,22	-0,25	-0,46		
22														

a_{ij}	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58
23									-2,00					
24													-0,44	-0,52
25														
26														
27														
28														
29														
30														
31									1,00					
32														
33														
34														
35			-1,15	-1,25	-1,15	-1,25								
36														
37														
38														
39														
40														
41	1,00	-0,89												
42					1,00	1,00								
43														
44														
45														
46														
47														
48														
49														
50														
51														
52														
53	-0,78												-0,52	-0,44
54		1,00												
55			1,00	1,00										
56										1,00	1,00	1,00		
57													-0,01	-0,01
58														
59														-0,01
60							1,00	1,00						

Tabela A.5 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 5-6.

a_{ij}	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72
1														
2														
3														
4														
5														
6														
7														
8														
9														
10														
11														
12	-0,04													
13				-0,91	-0,91	-0,91								
14	-1,02	-1,04	-1,03											
15														
16							-1,03	-1,03	-1,03	-1,03				
17														
18														
19														
20														
21											-1,02	-0,98	-0,97	
22														
23														
24														-1,02
25														
26														
27														
28														
29														
30														
31														
32														
33														
34														
35														

a_{ij}	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72
36														
37														
38														
39														
40														
41														
42														
43	1,00	1,00	1,00									-0,05	-0,05	
44				1,00	1,00	1,00								
45							1,00	1,00	1,00	1,00				
46											1,00	1,00	1,00	
47														1,00
48														
49														
50														
51														
52														
53														
54														
55														
56														
57				-0,54	-0,39	-0,54								
58														
59		-0,05	-0,02											
60														

Tabela A.6 – Coeficientes técnicos (a_{ij}) parte 6-6.

aij	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
1														
2														
3														
4														
5														
6										-0,01				
7									-0,86					
8														
9														
10														

aij	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
11														
12														
13														
14														
15														
16														
17														
18														
19														
20														
21														
22														
23														
24	-1,04	-1,02	-1,02	-1,03	-1,03	-1,03								
25														
26								-0,36	-0,36					
27														
28														
29														
30														
31														
32														
33														
34								0,34						
35														
36														
37						-0,01								
38														
39														
40							-0,75							
41										-0,98				
42														
43														
44														
45														
46														
47	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00								
48							1,00							
49								1,00	1,00					
50											1,00	1,00	1,00	1,00

aij	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
51										1,00				
52														
53		-0,02	-0,02								-1,04	-1,02	-1,12	-1,12
54										-0,06				
55														
56														
57							-0,02				-0,01		-0,01	
58														
59														
60														

APÊNDICE B – CÓDIGO GAMS PARA A PROGRAMAÇÃO LINEAR

```
Sets
i Produtos / 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25,
26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45,
46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60 /

j Processos / 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24,
25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45,
46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70,
71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86 /;

Parameters
D(i) demanda min de produto
/ 1 400025.60
  2 100742.70
  3 112883.80
  4 37619.20
  5 491561.30
  6 7286292.70
  7 592457.20
  8 23947.90
  9 1671744.80
 10 97384.10
 11 33430.80
 12 646049.60
 13 18447.50
 14 256942.60
 15 63626.30
 16 700218.60
 17 1231081.60
 18 160000.00
 19 169986.62
 20 22029.40
```

21 633180.40

22 0.00

23 83702.47

24 3111429.80

25 540139.80

26 445882.09

27 97462.40

28 480697.90

29 71785.20

30 0.00

31 6514.00

32 29567.90

33 22605.90

34 884029.70

35 22020.00

36 0.00

37 0.00

38 123202.70

39 1942778.30

40 261133.83

41 131964.30

42 76307.60

43 63642.10

44 47191.20

45 942539.51

46 373396.20

47 2133090.00

48 6500.82

49 522174.20

50 1391746.70

51 6637.10

52 0.00

53 2042160.90

54 34615.20

55 19597.50

56 61800.70

57 2505270.80

58 2327113.90

59 0.00

60 4513596.30 /

S(i) Restricao de fornecimento de produtos

/ 1 0.00

2 0.00

3 0.00

4 0.00

5 0.00

6 0.00

7 0.00

8 0.00

9 0.00

10 0.00

11 0.00

12 0.00

13 0.00

14 0.00

15 0.00

16 0.00

17 0.00

18 0.00

19 0.00

20 0.00

21 0.00

22 1790000.0

23 0.00

24 0.00

25 0.00

26 0.00

27 0.00

28 0.00

29 0.00

30 13800000.0

31 0.00

32 0.00

33 0.00

34 0.00

35 113525.10

36 6740000.0

37 500000.0

38 0.00

39 0.00

40 0.00

41 0.00

42 0.00

43 0.00

44 0.00

45 0.00

46 0.00

47 0.00

48 0.00

49 0.00

50 0.00

51 0.00

52 21000000.0

53 0.00

54 0.00

55 0.00

56 0.00

57 1353071.00

58 0.00

59 204949.90

60 0.00 /

P(i) Preco dos produtos

/ 1 5656.55

2 3339.81

3 1759.70

4 3598.22

5 1142.40

6 159.95

7 2223.21

8 3835.36

9 916.09

10 2324.04

11 2690.81

12 1809.47

13 3256.72

14 4484.88

15 5248.94

16 13041.90

17 255.85

18 2100.00

19 3198.14

20 5924.20

21 2358.00

22 525.00

23 2575.45

24 2137.64

25 2424.37

26 1882.31

27 2756.43

28 1279.56

29 3708.03

30 605.00

31 25272.67

32 7570.28

33 4285.22

34 614.46

35 1786.83

36 1541.15

37 835.00

38 2464.35

39 568.14

40 3198.04

41 3420.70

42 1950.72

43 6532.86

44 4587.12

45 2049.59

46 3370.22

47 2552.69

48 3076.83

49 2922.69

50 2864.72

51 5767.76

52 600.00

53 2318.13

54 2752.52

55 2576.95

56 3653.73

57 567.30

58 391.76

59 1663.82

60 726.03 /

H(i) Preco de queima

/ 1 939.80

2 3324.57

3 2527.74

4 1568.87

5 0.00

6 0.00

7 1591.75

8 1641.31

9 1368.71

10 1818.60

11 1162.84

12 3431.32

13 2626.86

14 3854.51

15 2382.86

16 1559.34

17 0.00

18 3560.95

19 2668.80

20 0.00

21 3450.38

22 4251.02

23 0.00

24 4125.21

25 3526.63

26 1559.34

27 2659.27

28 1559.34

29 0.00

30 9531.44

31 0.00

32 1529.00

33 1906.29

34 1860.54

35 3517.10

36 3907.89

37 4058.49

38 2960.46

39 0.00
40 2456.75
41 2739.34
42 3526.63
43 0.00
44 0.00
45 0.00
46 0.00
47 0.00
48 0.00
49 0.00
50 0.00
51 0.00
52 4127.11
53 4010.83
54 1946.32
55 3520.91
56 0.00
57 0.00
58 0.00
59 3478.98
60 861.64 /

B(j) Restricao de Capacidade instalada
/ 1 1080000.00
2 150000.00
3 119000.00
4 87000.00
5 661660.00
6 8213054.00
7 250000.00
8 100000.00
9 1588010.00
10 1588010.00

11 152000.00

12 30000.00

13 999076.00

14 999076.00

15 28000.00

16 466000.00

17 56000.00

18 320000.00

19 843100.00

20 843100.00

21 1520949.00

22 190000.00

23 540000.00

24 3952000.00

25 3952000.00

26 3952000.00

27 3952000.00

28 3952000.00

29 770000.00

30 500000.00

31 500000.00

32 196400.00

33 196400.00

34 787600.00

35 100000.00

36 50000.00

37 142857.14

38 266000.00

39 573002.00

40 309500.00

41 150000.00

42 150000.00

43 500000.00

44 500000.00

45 235000.00

46 86000.00

47 203000.00

48 203000.00

49 126000.00

50 126000.00

51 1782000.00

52 1782000.00

53 10000.00

54 107700.00

55 107700.00

56 107700.00

57 42000.00

58 42000.00

59 14250.00

60 14250.00

61 14250.00

62 15000.00

63 15000.00

64 15000.00

65 728500.00

66 728500.00

67 728500.00

68 728500.00

69 585500.00

70 585500.00

71 585500.00

72 3035000.00

73 3035000.00

74 3035000.00

75 3035000.00

76 3035000.00

77 3035000.00

78 3035000.00

79 10000.00

80 585000.00

81 585000.00

82 10000.00

83 1965000.00

84 1965000.00

85 1965000.00

86 1965000.00 /

C(j) Custo dos Processos de transformacao

/1 2454.98

2 4068.59

3 4090.64

4 2245.22

5 1821.01

6 362.76

7 3555.59

8 3688.65

9 1803.46

10 1950.75

11 3205.36

12 3931.53

13 2761.78

14 4871.59

15 4339.45

16 4800.56

17 6583.94

18 2889.09

19 6026.68

20 10084.90

21 833.76

22 4239.68

23 3898.21

24 4933.58

25 2579.04

26 3013.46

27 2109.15

28 3044.37

29 2571.60

30 3459.32

31 3011.54

32 3744.91

33 3694.64

34 1688.77

35 3809.53

36 4340.37

37 2974.76

38 3801.04

39 2563.45

40 1730.82

41 2868.85

42 2936.78

43 3041.59

44 3381.35

45 3440.77

46 4084.10

47 3338.09

48 2999.25

49 3268.65

50 3194.93

51 1175.47

52 1066.70

53 15334.20

54 5058.53

55 5699.87

56 4840.42

57 5096.62

58 4274.97

59 8436.30

60 8650.57

61 7919.38

62 6071.79

63 5025.38

64 5871.79

65 11241.21

66 11601.10

67 11788.24

68 11975.38

69 3508.41

70 3945.60

71 4115.62

72 3483.38

73 3485.51

74 3636.52

75 3881.03

76 3812.60

77 3674.85

78 3893.19

79 3722.44

80 2404.80

81 3945.92

82 4261.20

83 4167.61

84 3626.21

85 4920.88

86 5073.88/;

Table

a(i,j) Coeficientes tecnicos dos processos

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	
28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	

41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53
54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66
67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79
80 81 82 83 84 85 86

1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 -1.66 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 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
2 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 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 0
3 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.28 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0.61 0 0 -0.68 -0.68 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 0 0 0 0 0
0 0 0
4 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 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 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0

5 0 0 0 -0.73 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 -0.80 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 0 0 0
0 0

6 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 -0.08 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 -1.63 -1.63 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1.20 -0.02 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 -0.01 0 0
0 0

7 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 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 0 0 0 0 0 -0.86 0 0 0
0 0

8 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 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 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0

9 0 0 0 0 -0.28 0 0 -0.43 1 1 0 0 0 0
0 0 -1.48 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 -0.17 0 -0.22 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 -0.57 -0.57 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
10 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 0 -0.56 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 0 0 0 0
0 0
11 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 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 0 0 0 0 0
0 0
12 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1.19 1 1
-0.02 0 0 -0.67 0 0 0 0 0.03 0 0 0 0
0 -0.74 0 0 0 -0.94 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -2.25 0 0
0 0 0 -0.04 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
13 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 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 -0.91 -0.91 -0.91 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0
14 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 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.73 -0.76 -

0.56 0 0 -1.02 -1.04 -1.03 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0
15 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 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
16 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
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 -1.03 -1.03 -1.03 -1.03 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0
17 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 -0.61 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 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
18 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 -1.35 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 0 0 0 0 0 0
0 0
19 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 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
20 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
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 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
21 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 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.22 -0.25 -
0.46 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -
1.02 -0.98 -0.97 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0
22 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.92 0 -1.30 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 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
23 0 0 0 0 0 -0.45 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 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -2.00 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
24 -0.36 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 -0.48 0 0 0 0 0 1 1 1 1

-0.27 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
-0.44 -0.52 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 -1.02 -1.04 -1.02 -1.02 -1.03 -1.03 -1.03 0 0 0 0 0
0 0 0
25 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 -1.15 -1.14 0 0 0 0
0 0 -0.51 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 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
26 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 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 -0.36 -0.36 0 0 0
0 0
27 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.89 0 -0.92 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 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 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
28 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 -0.16 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 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

29 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 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 0 0 0
0 0
30 0 0 0 0 0 -1.35 0 0 -0.70 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 -0.12 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.92 -0.62 -
0.51 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 0 0
31 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
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 0 0 0 0 0 0
0 0
32 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 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 0 0 0 0 0
0 0
33 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 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 0 0 0 0 0 0
0 0
34 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 -1.18 -0.37 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 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0.34 0 0 0 0
0 0
35 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
0 0 0 0 -1.15 -1.25 -1.15 -1.15 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
36 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -1.02 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -3.25 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 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
37 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 -1.90 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 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 -0.01 0 0 0 0 0 0
0 0
38 0 0.11 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 -0.28 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 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
39 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 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 0 0
0 0
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 0 0 0 0
0 -0.87 0 0 0 0 0 0 -0.43 0 0 0 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 0 0 0 -0.75 0 0 0 0 0
0 0
41 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0.41 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 -0.89 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 -0.98 0 0
0 0
42 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.97 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 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
43 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

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.05
-0.05 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
44 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
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 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
45 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
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
46 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
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
1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0
47 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
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 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0
0 0
48 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
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 0 0 0 0
0 0
49 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
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
50 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
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
1 1
51 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
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 0 0
0 0
52 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.92 0 0 -
2.36 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
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0

53 0 -1.04 -0.85 0 0 0 0 -1.20 0 0 0 0 0 0
0 0 0 -0.38 0 0 0 0 0 -0.33 0.14 0.63 0.04
0.24 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -
0.74 -0.69 -0.96 -0.88 -0.78 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 -0.52 -0.44 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 -0.02 -0.02 0 0 0 0 0 0
0 -1.04 -1.02 -1.12 -1.12
54 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 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 -0.06 0 0
0 0
55 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 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 0 0 0
0 0
56 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 0 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
57 0 0 -0.01 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.01 0 0 0 0 0 1.12 -0.18 0 -0.01 0 0 -0.01
0 0 0 0 -0.01 -1.64 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 -0.01 -0.01 0 0 0 -0.54 -0.39 -0.54 0 0 0 0

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.02 0 0 0
-0.01 0 -0.01 0
58 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 4.40 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 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 0
0 0
59 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -2.69 -1.20
0 0 0 0 0 0 0 0 0.05 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 -0.01 0 -0.05 -0.02 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
60 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
0 0 0 0 0 0 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 0
0 0;

Variables

F(i) Qtd de petroquimico i comprada no inicio da rede

X(j) Qtd produzida pelo processo j

Q(i) Qtd vendida

Z Custo

Positive variables

F(i)

X(j)

Q(i);

```
Equations
supply(i) Limite de fornecimento de petroquimicos basicos para a cadeia petroquimica
demand(i) Max limite de vendas
cap(j) Restricao de cap. instalada
Balanco(i) Restricao de BM
Custo Funcao a ser minimizada;

supply(i).. F(i) =l= S(i);
demand(i).. Q(i) =g= D(i);
cap(j).. X(j) =l= B(j);
Balanco(i).. Q(i) =e= F(i) + sum((j), a(i,j)*X(j))  ;
Custo.. Z =e= sum((i), P(i)*F(i)) + sum((j), C(j)*X(j)) + sum((i), (-H(i))*(Q(i)-D(i)));

Model Case /all/;

Solve Case using lp minimizing Z;

display 'Distribuir as infeasibilities como seguem',
        F.infeas, X.infeas, Q.infeas, supply.infeas, cap.infeas, demand.infeas;

$ifi %system.lp% == cplex  file fslv Solver Option file / cplex.opt /; case.optfile=1;

* Tentar mover as infeasibilities para um só lado
putclose fslv / 'feasopt 1' / 'equation.feaspref 0' / 'demand.feaspref 1';

Solve case using lp minimizing z ;

display 'Todas as infeasibilities devem ficar do mesmo lado', F.infeas, X.infeas, Q.infeas,
demand.infeas;
abort$(sum((i), Q.infeas(i))) Q.infeas, demand.infeas;
abort$(sum(i,demand.infeas(i))<1e-5) Q.infeas, demand.infeas;
```

```
* Ajustando a demanda com base na relaxação encontrada
  D(i) = D(i)- demand.infeas(i);

Solve case using lp minimizing z ;

display 'Todas as infeasibilities devem ficar do mesmo lado', F.infeas, X.infeas, Q.infeas,
demand.infeas;
abort$(sum((i), Q.infeas(i))) Q.infeas, demand.infeas;
abort$(sum(i,demand.infeas(i))<1e-5) Q.infeas, demand.infeas;
```