

# ANÁLISE DOS CUSTOS DE PROJETO INDUZIDOS POR INCERTEZAS PARAMÉTRICAS.

Edward Thomas Fleury Mendonça Duarte

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: José Carlos Costa da Silva Pinto

Rio de Janeiro Março de 2011

# ANÁLISE DOS CUSTOS DE PROJETO INDUZIDOS POR INCERTEZAS PARAMÉTRICAS.

### Edward Thomas Fleury Mendonça Duarte

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:	
	Prof. José Carlos Costa da Silva Pinto, D.Sc.
	Prof. Marcio Schwaab, D.Sc.
	Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.
	Eng. Lincoln Fernando Lautenschlager Moro, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL MARÇO DE 2011 Duarte, Edward Thomas Fleury Mendonça

Análise dos Custos de Projeto induzidos por Incertezas paramétricas/ Edward Thomas Fleury Mendonça Duarte. Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2011.

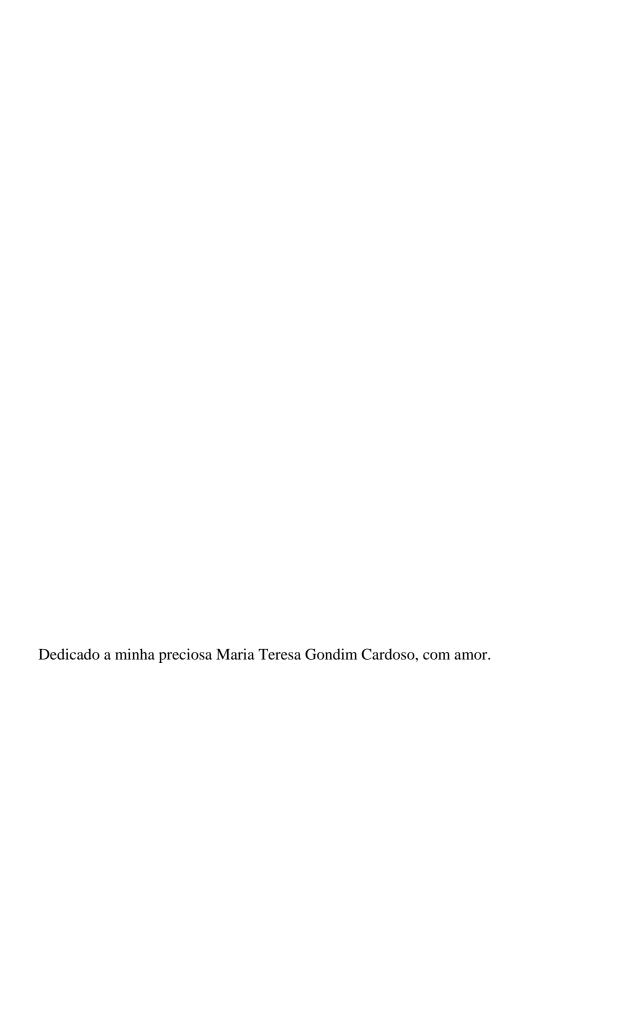
XXX, 242 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: José Carlos Costa da Silva Pinto

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2011.

Referências Bibliográficas: p. 172-177.

- 1. Incertezas paramétricas. 2. Modelagem e Otimização.
- 3. Método do Enxame de partículas. I. Pinto, José Carlos Costa da Silva. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.



Agradeço a Deus pela oportunidade de concluir este empreendimento; aos meus pais Eurípedes, Abadia e a minhas irmãs pelo carinho e o incentivo dispensados; a minha amada Maria Teresa pelas constantes palavras de ânimo e pela sua compreensão; ao meu orientador Prof. Dr. José Carlos Pinto pela direção segura e conselhos sempre pertinentes; aos amigos de trabalho da PETROBRAS, em especial aos grandes companheiros Eng. Dr. Felipe Carlos Paiva dos Santos e o Capitão de Cabotagem Guilherme José Pereira Pinto por me incentivarem a iniciar o mestrado; ao amigo Eng. Carlos Augusto Erthal Neto e a todos os amigos de minha gerência AB-LO/OL/SP, pelo apoio quando tinha que me ausentar do trabalho para freqüentar as aulas de mestrado, a minha atual gerente da AB-LO/OL/SP, Enga. Giselle Prata Guedes Coelho e a minha ex-gerente da AB-LO/OL/QP, Enga. Marlise Fany Lehner e ao gerente geral AB-LO/OL, Eng. Rubens de Avezedo Júnior que confiaram em mim e me deram a oportunidade de trilhar este desafio. Muito obrigado.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos

necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.).

ANÁLISE DOS CUSTOS DE PROJETO INDUZIDOS POR INCERTEZAS

**PARAMÉTRICAS** 

Edward Thomas Fleury Mendonça Duarte

Março/2011

Orientador: José Carlos Costa da Silva Pinto

Programa: Engenharia Química

Este trabalho apresenta um estudo sobre a influência das incertezas paramétricas

sobre as decisões tomadas em um ambiente em que há lapso de informação. As ações

tomadas para lidar com os riscos associados à incerteza recebem a denominação de

gestão de risco. O presente trabalho enfoca especificamente casos de tomada de decisão

que envolvem o dimensionamento de projetos típicos da Engenharia Química. Em geral,

os trabalhos anteriores da literatura propõem a avaliação do risco devido às incertezas

das variáveis de entrada, quase sempre custos de matérias-primas e preço de venda dos

produtos. O presente trabalho trata das incertezas paramétricas, empregando

metodologias propostas por diferentes autores, que permitem estimar a amplitude da

variação de lucro esperado a partir da delimitação de uma região de confiança do valor

esperado dos parâmetros de modelos. As referidas metodologias são aplicadas a dois

estudos de caso: o dimensionamento de um reator contínuo de mistura perfeita (CSTR)

e o de um sistema de bombeamento de petróleo. As análises propostas permitem

concluir que as incertezas paramétricas são tão ou mais importantes que as demais

incertezas de variáveis de entrada ou de saída. Destarte, não é possível realizar qualquer

dimensionamento de projeto sem que incertezas paramétricas sejam de alguma forma

consideradas.

vi

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the

requirementes for the degree of Master of Science (M.Sc.).

ANALYSIS OF DESIGN COSTS ASSOCIATED WITH PARAMETER

**UNCERTAINTIES** 

Edward Thomas Fleury Mendonça Duarte

March/2011

Advisor: José Carlos Costa da Silva Pinto

Department: Chemical Engineering

This paper carries out a study about the influency of parameter uncertainties on

decision making in environments with information gaps. The procedures usually used to

deal with risks associated with uncertainties are called risk assessment. This paper is

related to risk assessment applied to decision making for typical Chemical Engineering

projects. In general, earlier papers have proposed the evaluation of the risk associated

with input or output variables, such as raw material costs and product sale prices. Here,

parameter uncertainties are considered, using methodologies that have been proposed by

different authors. These methodologies provide an estimation of the amplitude of the

expected profit variations from the confidence region boundaries of the expected model

parameter values, and were applied to two case studies: design of a CSTR (Continuous

Stirred Tank Reactor) and a design of crude oil pumping system. The analysis proposed

here allowed one to conclude that parameter uncertainties are as important as (or maybe

more important than) other input and output variable uncertainties. For this reasion, it

does not seem appropriate to perform any project design without dealing with parameter

uncertainties.

vii

## **SUMÁRIO**

Capitulo	1: INTRODUÇÃO	1
1.1	INCERTEZA E RISCO: CONCEITO	3
1.2	CLASSIFICAÇÃO DAS INCERTEZAS	4
	1.2.1 Incertezas em variáveis medidas 5	
	1.2.2 Incertezas do modelo	
	1.2.3 Incertezas dos parâmetros do modelo	
1.3	DAS RELAÇÕES ENTRE A MODELAGEM DETERMINÍSTICA,	MO-
	DELAGEM PROBABILÍSTICA E ACASO	6
1.4	DAS GRANDEZAS FÍSICAS E GRANDEZAS DE VALORAÇÃO E	СÔ-
	NÔMICA	8
1.5	OBJETIVOS DA TESE	9
1.6	ESTRUTURA DA TESE	11
Canítulo	2: FUNDAMENTOS SOBRE DIMENSIONAMENTO DE PROJE	TAC
_		
_	ORIA DE TOMADA DE DECISÃO  DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA	13
E DA TE	ORIA DE TOMADA DE DECISÃO	13 14
<b>E DA TE</b> 2.1	ORIA DE TOMADA DE DECISÃO DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA	13 14 15
2.1 2.2	ORIA DE TOMADA DE DECISÃO  DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA  FATORES DE SEGURANÇA	13 14 15
2.1 2.2 2.3	ORIA DE TOMADA DE DECISÃO  DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA  FATORES DE SEGURANÇA  REGRAS HEURÍSTICAS (Rules of Thumb)	13 14 15 18
2.1 2.2 2.3 2.4	ORIA DE TOMADA DE DECISÃO  DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA  FATORES DE SEGURANÇA  REGRAS HEURÍSTICAS (Rules of Thumb)  DIMENSIONAMENTO POR OTIMIZAÇÃO	13 14 15 18 18
2.1 2.2 2.3 2.4	ORIA DE TOMADA DE DECISÃO  DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA  FATORES DE SEGURANÇA  REGRAS HEURÍSTICAS (Rules of Thumb)  DIMENSIONAMENTO POR OTIMIZAÇÃO  MÉTODOS E ESTRATÉGIAS DA TEORIA DE TOMADA	13 14 15 18 18 DE
2.1 2.2 2.3 2.4 2.5	DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA	13 14 15 18 18 DE 20
2.1 2.2 2.3 2.4 2.5  Capítulo	DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA	13 14 15 18 18 DE 20 31
2.1 2.2 2.3 2.4 2.5  Capítulo	DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA  FATORES DE SEGURANÇA  REGRAS HEURÍSTICAS (Rules of Thumb)  DIMENSIONAMENTO POR OTIMIZAÇÃO  MÉTODOS E ESTRATÉGIAS DA TEORIA DE TOMADA  DECISÃO  COMÉNTÁRIOS FINAIS  3: INCERTEZAS DE PROJETO E INCERTEZAS PARAMÉT	13 14 15 18 18 DE 20 31

3.3	COMO INCERTEZAS PARAMETRICAS CAUSAM INCERTEZAS DE
	PROJETO35
3.4	INFLUÊNCIA DAS INCERTEZAS PARAMÉTRICAS NO PROJE-
	TO36
3.5	METODOLOGIA PROPOSTA42
3.6	PROCEDIMENTO DE ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E GERAÇÃO
	DE REGIÃO DE CONFIANÇA PARAMÉTRICA44
3.7	PROCEDIMENTO PARA DETERMINAÇÃO DO PROJETO DE
	ROBUSTEZ MÁXIMA48
3.8	PROCEDIMENTO DE CÁLCULO DE TRADE OFF ENTRE
	ROBUSTEZ E OPORTUNIDADE48
3.9	PROCEDIMENTO PARA DETERMINAÇÃO DOS PONTOS DE
	EQUILÍBRO PARA OPERAÇÃO DO PROJETO52
3.10	COMENTÁRIOS FINAIS
Capítulo	4: ESTUDO DE CASO 1 - PROJETO DE UM REATOR
CSTR	53
4.1	PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL55
4.2	GERAÇÃO DOS DADOS PSEUDOEXPERIMENTAIS56
4.2.	I Distribuição de Probabilidade Uniforme57
4.2.	2 Distribuição de Probabilidade Normal58
4.2.	3 Distribuição de Probabilidade Weibull59
4.2.	4 Emprego de Modelo Equivocado61
4.3	ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E DELIMITAÇÃO DA REGIÃO DE
	CONFIANÇA PARAMÉTRICA64
4.3.	1 Influência do erro experimental79
4.3.2	2 Influência do emprego de um modelo equivocado93
4.3.3	3 Influência do número de pontos experimentais e réplicas96
4.3.4	Comentarios finais96
4.4	ESPECIFICAÇÃO DO PROJETO DO REATOR97
4.5	DETERMINAÇÃO DOS PREÇOS DE EQUILÍBRIO PARA
	OPERAÇÃO DOS PROJETOS134
4.6	COMENTÁRIOS FINAIS

Capítulo 5: ESTUDO DE CASO 2 - PROJETO DE UM SISTEMA DE BOM-
BEIO DE PETRÓLEO138
5.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA139
5.1.1. Discriminação dos custos associados ao projeto141
5.1.2. Restrições adotadas para o projeto149
5.2 RESULTADOS151
5.3 CONCLUSÕES
Capítulo 6: CONCLUSÃO E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTU-
ROS
6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS
Referências Bibliográficas
<b>Apêndice I</b> : ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO EMPREGANDO O MÉTODO DE ENXAME DE PARTÍCULAS, COMO PROPOSTO POR SCHWAAB <i>et al.</i> (2008a) E
ASSOCIADO AO MÉTODO DE NEWTON DESCRITO EM SCHWAAB e PINTO
(2007)
<b>Apêndice II</b> : ALGORITMO PARA BUSCA DO PROJETO DE ROBUSTEZ MÁXIMA, UMA VEZ CONHECIDA A FRONTEIRA DA REGIÃO DE CONFIANÇA PARAMÉTRICA
<b>Apêndice III:</b> ALGORITMO PARA DETERMINAÇÃO DE <i>TRADE OFF</i> ENTRE ROBUSTEZ, OPORTUNIDADE E NÍVEL DE RECOMPENSA CRÍTI-
CA181
ApêndiceIV:ALGORITMODEPLANEJAMENTOSEQUENCIALDEEXPERIMENTOS PARA DETERMINAÇÃO DO NOVO PONTO EXPERIMENTAL,SEGUNDOPROCEDIMENTOPROPOSTOPORSCHWAABetal.(2008b)186
Apêndice V: DADOS DE ENTRADA E RESULTADOS ADICIONAIS OBTIDOS
APÓS ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E DELIMITAÇÃO DA REGIÃO DE

CONFIANÇA F				
Apêndice VI: A				
Apêndice VII:	RESULTADOS	DA SIMULAÇ	ÃO DO DESEI	MPENHO DO
PROJETO DE D	UTO $Q = 240 \text{ m}$	il bpd (7 mil gp	m) PARA AS C	OMPOSIÇÕES
FACTÍVEIS DA	GRADE EXP	ERIMENTAL, I	NCERTEZAS A	PENAS NAS
COTAÇÕES	DE	PETRÓLEO	Е	DERIVA-
DOS				210
Apêndice VIII:		_		
PROJETO DE D	_			
FACTÍVEIS DA	GRADE EXPERI	MENTAL, INCE	RTEZAS NAS C	OTAÇÕES DE
PETRÓLEO E D				
CORREÇÃO DE	VISCOSIDADE			214
Amorro A. DDOV	A DO TEODEMA	E DO CODOL Á	DIO 2.1 ADDEC	
Anexo A: PROVA				
BEN-HAIM (2000	J)	••••••	•••••	219
<b>Anexo B</b> : PROVA	A DO TEOREMA	E DO COROLÁ	RIO 2-2, APRES	ENTADO POR
BEN-HAIM (2000				
Anexo C: PROVA	A DO TEOREMA	2-3 E COROLÁ	RIO 2-5, APRES	ENTADO POR
BEN-HAIM (2000	))			223
Anexo D: PRO	OCEDIMENTO	PARA ANÁLIS	SE DA QUAL	IDADE DOS
PARÂMETROS				
(2007)				225
		,		<u>-</u> .
Anexo E: PROCE				
DO MODELO				
(2007)				228

Anexo	F:	DEMO	ONSTRAÇÃ	O DA	DEPE	NDÊNCIA	DO	PONTO	DE
DIMEN	SION	AMEN'	го о́тімо	EM REL	AÇÃO A	ÀS INCER	RTEZAS	PARAMÉ	TRI-
CAS (PI	NTO,	1998)		••••••	••••••		•••••		230
Anexo (	G: PR	ROCED	IMENTO PA	ARA AN	ÁLISE O	BJETIVA	DA QU	ALIDADE	E DO
AJUSTE	Ε	DO	MODELO	SEG	UNDO	SCHW	AAB	e PI	NTO
(2007)	•••••								232
Anexo	<b>H</b> : P	PROVA	DO TEOR	REMA B	ERRY-E	SSEEN, S	SEGUNI	OO KOLA	SSA
(1997)	•••••								234
Anexo	<b>I</b> : T <i>A</i>	ABELA	SOBRE D	IMENSÕ	ES PAD	PRÕES E	PROPR	LIEDADES	DE
TUBOS	(LUI	OWIG, 1	.999)		•••••	••••••	•••••	•••••	237
Anexo J	: EQI	UAÇÕE	ES PARA ES	TIMAÇÃ	O DE CU	JRVAS CA	ARACTI	ERÍSTICA	S DE
BOMBA	AS TR	RANSC	RITAS A PA	ARTIR D	E ÁBAC	OS DE K	ARASSI	K (MATT	OS e
FALCO	, 1998	3)					•••••		239
Anexo ]	<b>K:</b> E(	QUAÇĈ	DES PARA	CORREÇ	ZÃO DE	PERFORM	MANCE	DE BOM	BAS
		_	VISCOSOS,	_					
			ΓΕ (LUDWI						

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3-1: Desenho esquemático sobre o procedimento de discretização dos limites da fronteira de uma dada região de confiança paramétrica
Figura 3-2: Desenho esquemático demonstrando as coordenadas de parâmetros utilizados para calcular a função objetivo lucro
Figura 4-1: Esquema do reator CSTR
Figura 4-2: Aspecto da distribuição de Weibull com $\alpha = 1,50$ e $\beta = 1,00$ 60
Figura 4-3: Comparação do comportamento da reação 1 descrita pela Equação (4.3), considerando: ( $\blacktriangle$ ) Equação cinética de primeira ordem; ( $\blacksquare$ ) Equação cinética <i>LHHW</i> com $k_1 = 3,50 \text{ kg/(m}^3.\text{h})$ e $k_1' = 5,80 \text{x} 10^{-4} \text{ m}^3/\text{kg}$ (Equação 4.10)
Figura 4-4: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades uniforme e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança geral que satisfaz a Equação (3.20). Os pontos quadrados claros em torno dos subeixos tendo como ponto de origem o centro da região elíptica representam a segunda metade dos conjuntos de pontos do espaço paramétrico que satisfazem o critério da região de confiança generalizada, o que evidencia a dinâmica de procura dos parâmetros ótimos do MEP
Figura 4.5: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades uniforme e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de Parâmetros empregando

FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de
confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)71
Figura 4-6: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de Parâmetros empregando FMQP.A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)
Figura 4-7: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de Parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)
Figura 4-8: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades de Weibull e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de Parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)
Figura 4-9: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades de Weibull e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de Parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)
Figura 4-10: Regiões de Confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados a partir do modelo de <i>LHHW</i> com distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)

Figura 4-11: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados a partir do modelo de Langmuir com distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).......74

Figura 4-16: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades de Weibull e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando

escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)
Figura 4-17: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades de Weibull e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)
Figura 4-18: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados a partir do modelo <i>LHHW</i> com distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de Dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)
Figura 4-19: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados a partir do modelo <i>LHHW</i> com distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20)
Figura 4-20: Desenho esquemático que representa a dinâmica de busca do Método do Enxame de Partículas
Figura 4-21: Comparação das funções de distribuição de probabilidades acumulada Normal (■), Uniforme (□) e de Weibull (x) para os desvios padrões do vetor A84
Figura 4-22: Comportamento da função lucro em função d $\Theta$ e V para os parâmetros cinéticos $k_1 = 2,50 \text{ h}^{-1}$ e $k_2 = 1,00 \text{ h}^{-1}$
Figura 4-23: Curvas de nível da função lucro em função d $\Theta$ e V para os paâmetros cinéticos $k_1 = 2.50 \text{ h}^{-1}$ e $k_2 = 1.00 \text{ h}^{-1}$

Figura 4-24: Comportamento da função lucro em função d $\Theta$ e V para os paâmetros cinéticos $k_1 = 1,6946 \mathrm{h}^{-1}$ e $k_2 = 2,2671 \mathrm{h}^{-1}$
Figura 4-25: Curvas de nível da função lucro em função de $\Theta$ e V para os paârmetros cinéticos $k_1 = 1,6946 \text{ h}^{-1}$ e $k_2 = 2,2671 \text{ h}^{-1}$
Figura 4-26: Especificações de V, Θ e Lucro para projetosótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP102
Figura 4-27: Gráfico  versus V dos Projeto  possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP
Figura 4-28: Gráfico V versus lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP
Figura 4-29: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-30: Gráfico V versus lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-31: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP
Figura 4-32: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP

Figura 4-33: Gráfico $\Theta$ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-34: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-35: Gráfico $\Theta$ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões A e estimação
de parâmetros por FMQP
Figura 4-36: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por FMQP107
Figura 4-37: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica geral do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados107
Figura 4-38: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-39: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões B e estimação
de parâmetros por FMQP108
Figura 4-40: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por FMQP109

Figura 4-41: Gráfico $\Theta$ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões B e estimação
de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-42: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-43: Gráfico $\Theta$ versus $V$ dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões A e estimação
de parâmetros por FQMP
Figura 4-44: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por FMQP
Figura 4-45: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvio padrão B e estimação
de parâmetros por Reconciliação de dados111
Figura 4-46: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados112
Figura 4-47: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação
de parâmetros por FMQP
Figura 4-48: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por FMQP113

Figura 4-49: GráficoΘ versus V dos Projetostimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-50: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados114
Figura 4-51: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por FMQP
Figura 4-52: Gráfico V versus Lucro dos Projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por FMQP
Figura 4-53: Gráfico $\Theta$ versus $V$ dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-54: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões A e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados116
Figura 4-55: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região
de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por FMQP
Figura 4-56: Gráfico V versus Lucro dos Projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por FMQP117

Figura 4-57: GráficoΘ versus V dos Projetostimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-58: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da
região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões B e
estimação de parâmetros por reconciliação de dados
Figura 4-59: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por
FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possiveis da
referida região de confiança paramétrica
Figura 4-60: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por
reconciliação de dados. A curva (  ) representa os projetos ótimos para todas
configurações possiveis da referida região de confiança paramétrica120
Figura 4-61: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição uniforme, vetor de desvio padrão B e estimação de parâmetros por
FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da
referida região de confiança paramétrica
Figura 4-62: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por
reconciliação de dados. A curva (  ) representa os projetos ótimos para todas
configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica121
Figura 4-63: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por
FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da
referida região de confiança paramétrica

Figura 4-64: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por
reconciliação de dados. A curva (  ) representa os projetos ótimos para todas
configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica122
Figura 4-65: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por
FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da
referida região de confiança paramétrica
Figura 4-66: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por
reconciliação de dados. A curva (  ) representa os projetos ótimos para todas
configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica123
Figura 4-67: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros
por FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações
possíveis da referida região de confiança paramétrica
Figura 4-68: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros
por reconciliação de dados. A curva (  ) representa os projetos ótimos para todas
configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica124
Figura 4-69: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros
por FMQP. A curva (a) representa os projetos ótimos para todas configurações
possíveis da referida região de confiança paramétrica
Figura 4-70: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros
por reconciliação de dados. A curva ) (representa os projetos ótimos para todas
configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica125

Figura 4-71: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
LHHW, distribuição normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por
FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da
referida região de confiança paramétrica126
Figura 4-72: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
LHHW, distribuição normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por
reconciliação de dados. A curva (  ) representa os projetos ótimos para todas
configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica126
Figura 4-73: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
LHHW, distribuição normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por
FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da
referida região de confiança paramétrica
Figura 4-74: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso
LHHW, distribuição normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por
reconciliação de dados. A curva representa os projetos ótimos para todas
configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica127
Figura 4-75: Margem bruta média de equilíbrio para o ajuste Modelo CPO, distribuição
uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP. Foi feita a
média da margem bruta calculada para as seguintes condições: Volume do reator =4,0
m3; Condição 1: $\{k_1 = 2,4662 \text{ h}^{-1}; k_2 = 1,0737 \text{ h}^{-1}\}$ (condição do projeto de robustez
máxima) e Condição 2: { $k_1 = 2,6328 \text{ h}^{-1}$ ; $k_2 = 0,9905 \text{ h}^{-1}$ } (condição do projeto
nominal)
Figura 4-76: Margem bruta média de equilíbrio para o ajuste Modelo CPO, distribuição
uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP. Foi feita a
média da margem bruta calculada para as seguintes condições: Volume do reator =1,4
m3; Condição 1: $\{k_1 = 1,2437 \text{ h}^{-1}; k_2 = 1,0519 \text{ h}^{-1}\}\ $ (condição do projeto de robustez
máxima) e Condição 2: $\{k_1 = 1,6675 \text{ h}^{-1}; k_2 = 0,9643 \text{ h}^{-1}\}\ $ (condição do projeto
nominal)

de petróleo. UDAV refere-se ao conjunto de unidades de destilação atmosférica e à vácuo da refinaria
Figura 5-2: Esquema da vista lateral do problema de dimensionamento de um sistema de bombeio de petróleo. Logo abaixo, é mostrada a configuração do parque de bombas constituídas de 3 bombas centrífugas multiestágio em série
Figura 5-3: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 201 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente
Figura 5-4: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 240 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente
Figura 5-5: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 280 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente
Figura 5-6: Curva de performance das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 320 mil bpd. Símbolos (■) e ( ●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente
Figura 5-7: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 360 mil bpd. Símbolos (•) e (•) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente

## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1: Dados disponíveis de preços de matérias-primas, de produtos, de sub-
produto e outros custos (PINTO, 1998)53
Tabela 4.2: Faixa experimental estipulada no planejamento fatorial do Estudo de Caso  1
Tabela 4.3: Plano fatorial para o Estudo de Caso 1, com as concentrações de saída esperadas para o modelo verdadeiro, antes da etapa de corrupção dos dados com erros aleatórios
Tabela 4.4: Valores de desvios padrões σ adotados para corromper modelo do Estudo de Caso 1
Tabela 4.5: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição uniforme com vetor de desvios padrões A para o Estudo de Caso 1
Tabela 4.6: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição uniforme com vetor de desvios padrões B para o Estudo de Caso 1
Tabela 4.7: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da Distribuição Nornal com Vetor de Desvios padrão A para o Estudo de Caso 1
Tabela 4.8: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da Distribuição Normal com Vetor de Desvios padrão B para o Estudo de Caso 1

Tabela 4.9: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição de Weibull com
o vetor de desvios padrões A para o Estudo de Caso 1
Tabela 4.10: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição de Weibul com o vetor de desvios padrões B para o Estudo de Caso 1
Tabela 4.11: Dados pseudoexperimentais gerados com o modelo cinético LHHW utilizando distribuição de probabilidade normal, com o vetor de desvios padrões A para o Estudo de Caso 1
Tabela 4.12: Dados pseudoexperimentais gerados com o modelo cinético LHHW utilizando distribuição de probabilidade normal, com o vetor de desvios padrões B para o Estudo de Caso 1
Tabela 4.13: Parâmetros de busca arbitrados para execução do Algoritmo MEP de estimação de parâmetros, descrito no Apêndice I, para o Estudo de Caso 165
Tabela 4.14: Resultados da estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança para o plano experimental com 5 condições experimentais. Modelo CPO Cinética de Primeira Ordem e FMQP: Função dos Mínimos Quadrados Ponderados67
Tabela 4.15a: Resultados da estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança para o plano experimental com 5 pontos experimentais. Modelo CPO Cinética de Primeira Ordem
Tabela 4.15b: Resultados da estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança para o plano experimental com 5 pontos experimentais. Modelo CPO Cinética de Primeira Ordem
Tabela 4.15c: Resultados da estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança para o plano experimental com 5 pontos experimentais. Modelo CPO Cinética de Primeira Ordem

Tabela 4.16a: Erros das variáveis de entrada e de saída dos Conjuntos de dados pseudoexperimentais, sobre os quais foram testados a hipótese de serem uma
distribuição normal com $\mu = 0$ e variância $\sigma 2$
Tabela 4.16b – CONTINUAÇÃO: Erro das variáveis de entrada e de saída dos
Conjuntos de dados pseudoexperimentais, sobre os quais foram testados a hipótese de
serem uma distribuição normal com $\mu = 0$ e variância $\sigma 2$
Tabela 4.16c - CONTINUAÇÃO: Erro das variáveis de entrada e de saída dos
Conjuntos de dados pseudoexperimentais, sobre os quais foram testados a hipótese de serem uma distribuição normal com $\mu=0$ e variância $\sigma^2$ 82
Tabela 4.17a: Teste $\chi^2$ das variâncias amostrais provenientes das 3 réplicas do ponto
central de cada conjunto de dados pseudoexperimentais e que foram adotadas no cálculo
da função objetivo da FMQP e da Reconciliação de Dados
Tabela 4.17b – Continuação: Testex $^2$ das variâncias amostrais provenientes das 3
réplicas do ponto central de cada conjunto de dados pseudoexperimentais e que foram
adotadas no cálculo da função objetivo da FMQP e da Reconciliação de Dados86
Tabela 4.18: Desvios padrões a partir das coordenadas do ponto ótimo e dos pontos
extremos da fronteira da região de confiança paramétrica
Tabela 4.19: Erro associado à perturbações aleatórias com desvios padrões A e B e o
equívoco da escolha do modelo para ajuste94
Tabela 4.20: Projetos e lucros nominais relativos aos parâmetros ótimos encontrados
pela estimação de parâmetros, dispostos nas Tabelas 4.14 e 4.15a98
Tabela 4.21: Projetos encontrados de acordo o critério MAX MIN Lucro, que representa
a condição de robustez máxima
Tabela 4.22: Robustez e Oportunidade em função dos níveis de recompensa crítica Rc e
recompensa dos sonhos Rw e seus respectivos projetos para o problema de ajusto do

FMQP e vetor de desvios padrões A
Tabela 4.23: Robustez e Oportunidade em função dos níveis de recompensa crítica Rc e recompensa dos sonhos Rw e seus respectivos projetos para o problema de ajusto do modelo CPO, distribuição de probalidades uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões B
Tabela 5.1: Lista de conexões e acessórios de tubulação presente no sistema de duto a ser projetado, bem como os respectivos valores de perda de carga associada (LUDWIG, 1999; KERN, 1975)
Tabela 5.2: Lista de itens mais representativos dos custos de investimento para construção de um duto de petróleo e suas respectivas estimativas. DN representa o diâmetro nominal do tubo dado em polegadas e L é a extensão do duto dado em quilômetros (RENNÓ e LEMGRUBER, 2009; PARKER, 2004)
Tabela 5.3: Propriedades mecânicas especificadas segundo a norma API 5L para tubos de aço e o seu custo de aquisição (VIEIRA, 2009; PARKER, 2004)142
Tabela 5.4: Lista de itens constituintes do Custo de capital devido investimento para construção do sistema de bombeio, bem como o Custo operacional mensal do terminal de petróleo(RENNÓ e LEMGRUBER, 2009; CEMIG, 2010)
Tabela 5.5: Dimensões e informações sobre capacidade e lastro de tanques de aço soldado com teto flutuante para armazenamento de petróleo145
Tabela 5.6: Propriedades relevantes dos petróleos disponíveis para bombeio pelo duto
Tabela 5.7: Cotações absolutas e spreads (preço referenciado) dos petróleos disponíveis para processamento, bem como receita bruta obtida para cada corte do petróleo148

Tabela 5.8a: Resultados do dimensionamento otimizado do duto de petróleo para
diferentes vazões de projeto
Tabela 5.8b: Resultados do dimensionamento otimizado do duto de petróleo para
diferentes vazões de projeto
Tabela 5.8c: Resultados do dimensionamento otimizado do duto de petróleo para
diferentes vazões de projeto
Tabela 5.9: Faixa de variação das cotações e spreads dos petróleos A, B, C e D.
Igualmente é apresentado a receita bruta advinda por cada corte de petróleo160
Tabela 5.10: Desempenho dos seis projetos diante do pior cenário dentre a faixa de
incerteza acerca do mistura de petróleo que será bombeada e cenário de preços médios
para os próximos 30 anos
Tabela 5.11: Desempenho dos seis projetos diante do cenário dos sonhos dentre a faixa
de incerteza acerca do mistura de petróleo que será bombeada e cenário de preços
médios para os próximos 30 anos
Tabela 5.12: Desempenho dos seis projetos diante do pior cenário dentre a faixa de
incerteza acerca do mistura de petróleo que será bombeada, cenário de preços médios
para os próximos 30 anos e incerteza de dois parametros da Equação
(5.38)
Tabela 5.13: Desempenho dos seis projetos diante do cenário dos sonhos dentre a faixa
de incerteza acerca do mistura de petróleo que será bombeada, cenário de preços médios
para os próximos 30 anos e incerteza de dois parametros da da Equação
(5.38)

### CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

O Método Científico propõe o estudo sistemático da Natureza por meio de experimentos planejados, buscando encontrar leis gerais que expliquem fenômenos passíveis de observação. Para um engenheiro, a melhor forma de expressar estas leis é descrevendo-as com o auxílio de equações que formam um modelo matemático (PETROSKI, 1994).

Para que seja possível expressar as observações em termos numéricos, utiliza-se normalmente o seguinte procedimento (PETROSKI, 1994):

- Identificar e isolar as variáveis de entrada (causas) e de saída (efeitos) pertinentes ao fenômeno estudado. Levantar informações sobre casos passados e a existência de alguma teoria em vigor (revisão bibliográfica da literatura);
- Montar um plano experimental baseado no conhecimento já disponível;
- Medir direta ou indiretamente as variáveis de entrada e de saída e expressar os resultados em uma escala numérica;
- Elaborar um modelo adequado para representar o fenômeno;
- Verificar se as predições são condizentes com a realidade. Em caso positivo, deve-se prosseguir para o próximo passo; caso contrário, deve-se retornar para uma nova etapa de planejamento experimental ou modificar o modelo;
- Reavaliar a teoria inicial: se ela estiver de acordo com as evidências experimentais, a teoria pode ser mantida; caso contrário, a estrutura teórica deve ser reformulada.

Permeando todas as etapas necessárias para a construção do conhecimento, encontram-se incertezas originárias das mais diversas fontes, tais como flutuações ruidosas, imprecisões na medição das variáveis, limitação técnica oriunda do equipamento utilizado para efetuar as medições, dentre outras (PINTO, 1998).

Adicionalmente, registre-se que a realidade e o modelo concebido nunca são totalmente similares, já que não é possível avaliar todas as variáveis de um problema, de maneira que muitas destas não são levadas em consideração durante o desenvolvimento do modelo. Algumas vezes, a realidade não é completamente compreendida; mesmo que fosse, o modelo resultante seria tão complexo que sua aplicação seria provavelmente inviável em problemas práticos. Por todos estes motivos, as predições obtidas com o modelo contêm incertezas, usualmente expressas como incertezas dos parâmetros estimados e que refletem as imprecisões de concepção do modelo e dos erros experimentais (PINTO, 1998).

Os modelos matemáticos (teóricos ou empíricos) são utilizados como base para o processo de tomada de decisões durante a concepção de projetos de processos e equipamentos (DOERING e GADDY, 1979; PINTO, 1998). Por isso, as incertezas relativas ao modelo exercem forte influência sobre as técnicas de análises de confiabilidade e de avaliação dos riscos de projeto (DER KIUREGHIAN e DITLEVSEN, 2009).

Uma das conseqüências associadas às incertezas descritas anteriormente é que elas afetam diretamente o dimensionamento de projetos, bem como a sua rentabilidade. Por exemplo, plantas industriais químicas são normalmente projetadas e construídas tendo como base as condições médias ou esperadas de operação. No entanto, variações dessas condições operacionais, tais como temperatura e vazão, podem tornar o processo inoperante ou ineficiente, a menos que tais flutuações sejam consideradas durante o dimensionamento do projeto (DOERING e GADDY, 1979). Dado que as plantas químicas nunca operam exatamente nas condições nominais de projeto e no estado estacionário, é imprescindível incluir aspectos de flexibilidade, robustez e superdimensionamento (*overdesign*) em projetos, para compensar de alguma forma as incertezas de operação (MORARI, 1983).

Superdimensionamentos são frequentemente incluídos no projeto para permitir que as variações operacionais e outras incertezas inerentes do processo tenham seus efeitos amortecidos sobre o desempenho do processo (DOERING e GADDY, 1979). Todavia, o superdimensionamento representa custo adicional ao orçamento do projeto, diminuindo a rentabilidade da operação. Portanto, não há dúvidas de que a existência de incertezas provoca o aumento dos custos e a redução do lucro do empreendimento. Diante deste cenário, o projetista precisa tomar decisões sobre quanto deve superdimensionar o projeto para garantir sua operação eficiente, segura para os

trabalhadores e o meio ambiente, conciliando esses objetivos com o compromisso de maximizar o retorno financeiro do investimento.

O processo de tomada de decisão na presença de incertezas é um ponto chave durante o projeto de processos. Desde os estágios preliminares, decisões são tomadas a partir de informações limitadas, relacionadas ao modelo de projeto adotado (constantes cinéticas, coeficientes de transferência de calor e de massa etc), ao ambiente externo (demanda de produto, disponibilidade de matéria-prima etc), dentre muitas outras (BERNARDO et al., 2003). A abordagem tradicional para lidar com essas incertezas baseia-se no paradigma determinístico, em que os valores ótimos de dimensionamento são obtidos a partir dos valores nominais dos parâmetros, os quais são considerados quase sempre conhecidos e fixos ao longo do tempo de vida útil do processo. Em seguida, uma solução é proposta com a aplicação de fatores de correção empíricos, que corrigem os tamanhos dos equipamentos. Estes fatores de segurança podem ser encontrados na literatura para diferentes tipos de equipamento e são provenientes da experiência acumulada, extrapolada para uma nova situação. Saliente-se que este fato pode acarretar em superdimensionamento ou subdimensionamento desnecessários, se tais fatores não forem usados com o devido discernimento (BERNARDO et al., 2003).

Nas últimas três décadas, diversas abordagens foram propostas baseadas em ferramentas de otimização e na aplicação de teorias de tomada de decisão para lidar com as incertezas em problemas de dimensionamento de projetos. O desenvolvimento de sistemas computacionais avançados abriu caminho para o florescimento desta área particular de pesquisa (BERNARDO *et al.*, 2003).

Os conceitos de incerteza e risco serão explorados com maior profundidade nas próximas seções deste capítulo. Uma avaliação detalhada sobre as metodologias propostas até o momento na literatura para tratar dos problemas decorrentes das incertezas será apresentada no Capítulo 2.

#### 1.1 INCERTEZA E RISCO: CONCEITO

Na literatura técnica, há uma certa confusão entre os conceitos de *incerteza* e de *risco*, pois ambos se apresentam usualmente associados e relacionados entre si como causa e efeito. Por isso, há uma estreita relação entre duas ideias, a mente humana

apresenta uma forte tendência de confundi-las, usando-se um conceito em lugar do outro em discursos e raciocínios (HUME, 1739).

O termo *incerteza* refere-se à lacuna de informação existente entre o que é conhecido em um dado instante e o que é necessário para que tomem as decisões corretas. A incerteza, portanto, representa uma limitação sobre o entendimento do problema. O conceito de incerteza é o complemento do conhecimento, quando se tem a exata noção do que se deve saber (BEN-HAIM, 2000). A falta de informação que gera a incerteza faz com que aquele que detém o poder decisório (*o decisor*) tome uma decisão sem todas as informações necessárias para que se tome a decisão mais acertada. Desta forma, existe sempre uma possibilidade de que a expectativa do decisor não se confirme e se obtenha um resultado indesejável.

Denomina-se *risco* o potencial de ocorrência de uma conseqüência não esperada (no caso financeiro, por exemplo, poderia ser um prejuízo) sob determinadas condições de aposta, uma vez que não se sabe se a expectativa considerada no momento da decisão será de fato concretizada. O termo *risco* tem origem etimológica duvidosa; porém, a teoria mais aceita atualmente é que ela surgiu da palavra usada para designar *penhasco*, em grego *rhiza*; no latim vulgar *resecum*. A figura do penhasco ou recife evoca o principal perigo enfrentado pelos primeiros navegadores portugueses, espanhóis e italianos do século XVI, que não contavam com o apoio de mapas cartográficos: serem jogados pelo mar contra penhascos ou pedras submersas, resultando em dificuldades que deveriam ser evitadas a qualquer custo (BEN-HAIM, 2000; DNV, 2010).

## 1.2 CLASSIFICAÇÃO DAS INCERTEZAS

As incertezas podem ser classificadas sob vários aspectos. Dentre as inúmeras propostas de classificação apresentadas na literatura, as mais geral está relacionada com a natureza da incerteza, conforme proposto por DER KIUREGHIAN e DITLEVSEN (2009):

 Incertezas aleatórias: são aquelas intrinsecamente aleatórias, que não podem ser associadas à conjunção de causa e efeito e não podem ser reduzidas com mais experimentos. O termo aleatório deriva da palavra latina alea, que significa lançamento de dados; • Incertezas epistêmicas: são aquelas causadas pela lacuna de conhecimento, caracterizado pela falta de dados experimentais adicionais, limitações de precisão de medição e de equipamentos disponíveis. A palavra epistêmico deriva do termo grego episteme, que significa conhecimento. As incertezas epistêmicas podem ser minimizadas com maior número de experimentos ou emprego de tecnologia de medição alternativa.

Quanto às fontes, as incertezas podem ser divididas em três grupos, como será discutido a seguir (DER KIUREGHIAN e DITLEVSEN, 2009; BERNARDO *et al.*, 2003).

#### 1.2.1 Incertezas em variáveis medidas

As incertezas em variáveis medidas englobam as incertezas resultantes de medição indireta, baixa precisão e/ou baixa repetibilidade dos equipamentos de medida, presença de ruídos aleatórios e o mau controle de outras variáveis interferentes. Normalmente, as variáveis medidas constituem a base para a estimação de parâmetros e ajuste do modelo. Por isso, as incertezas de medição estão presentes em todas as etapas do projeto:

- Durante a obtenção de dados experimentais em plantas piloto ou de bancada, usados posteriormente para o ajuste das equações de projeto por estimação de parâmetros, antes da etapa de dimensionamento do projeto;
- Após a conclusão do projeto, presentes nas flutuações de variáveis de processo, tais como de vazões e temperaturas, normalmente registrados por medição em linha:
- Durante a concepção de projeto, presentes em condições externas, tais como os coeficientes de estimação do custo de equipamentos, disponibilidade e preço de compra de matérias-primas, demanda de produto final, estimados a partir de dados de mercado, informação de fornecedores ou da literatura técnica e extrapolados para o tempo de vida do projeto;

#### 1.2.2 Incertezas do modelo

As incertezas do modelo podem ser originadas por dois motivos principais:

- Ao simplificar a equação do modelo, quando alguma variável de menor influência pode ser desprezada da análise, gerando incerteza sobre o efeito desta variável sobre a predição do modelo;
- Potencial inadequação do modelo para representar o problema, apesar de todas as variáveis pertinentes serem incluídas na estrutura matemática proposta.

### 1.2.3 Incertezas dos parâmetros do modelo

As incertezas paramétricas resultam da escassez de dados experimentais a serem ajustados para o modelo. Normalmente, incertezas paramétricas são de natureza epistêmica; ou seja, decrescem com a maior disponibilidade de informação. Por isso, são usualmente chamadas de incertezas *redutíveis*. Há casos, porém, em que a obtenção de dados adicionais não é possível. Por exemplo, não é possível prever a variabilidade das expectativas de demanda de um dado produto com antecedência de cinco anos. Não há como repetir experimentos nessas condições. Portanto, apenas é possível fazer uma extrapolação a partir de dados passados. Logo, essa incerteza paramétrica não é *redutível*.

## 1.3 DAS RELAÇÕES ENTRE A MODELAGEM DETERMINÍSTICA, MODELA-GEM PROBABILÍSTICA E ACASO.

A modelagem determinística dos fenômenos naturais é a abordagem mais amplamente adotada na Ciência, por ser intuitiva para a maneira com que o cérebro humano trabalha o entendimento. As ideias surgem na mente como reflexo de impressões percebidas do ambiente externo, as quais são armazenadas na memória associadas com outras ideias formadas anteriormente, o que permite a mente ir de uma ideia para a outra. Há três possíveis associações entre ideias: semelhança, contiguidade (no tempo e no espaço) e causalidade (causa e efeito) (HUME, 1739).

A causalidade é estabelecida por inferência, a partir da verificação na memória de experiências passadas, onde foi percebida a conjunção constante de um objeto em

relação ao outro, contíguos no tempo e no espaço (HUME, 1739). A partir da inferência da causalidade, o Método Científico fornece ferramentas para que se possa construir um modelo determinístico que represente os objetos de estudo.

Segundo HUME (1739), a razão humana pode ser descrita em termos de *conhecimento*, *provas* e *probabilidades*. Por *conhecimento*, entende-se a certeza resultante da comparação de ideias. Por *provas*, entendem-se os argumentos derivados da relação de causa e efeito e que estão inteiramente livres de dúvidas e incerteza. Por *probabilidade*, entende-se a evidência que ainda se faz acompanhar de incerteza.

As probabilidades são fundamentadas em dois conceitos (HUME, 1739):

- Acaso (aleatoriedade): O acaso é a completa negação de uma causa, o qual produz uma total indiferença na mente, de forma que uma oportunidade não pode ser considerada mais provável do que outra, a menos que seja possível fundamentar uma maior probabilidade com uma causa que a explique. Tão logo é aceita a existência de uma causa, imediatamente a hipótese de aleatoriedade é derrubada. Embora os conceitos de acaso e de causalidade sejam contrários, é impossível conceber que uma oportunidade seja superior à outra sem supor que exista uma mistura de causas entre as diferentes oportunidades. Essa conjunção dá origem às diversas distribuições de probabilidades propostas na literatura (HUME, 1739).
- Incerteza sobre as causas: A probabilidade de causas baseia-se na associação da impressão presente com casos semelhantes no passado. À medida em que se aumenta o número de casos observados, a probabilidade ganha força, sendo portanto uma gradação que vai da simples suposição baseado em uma observação até a prova cabal e inequívoca de causalidade, quando todas as observações confirmam isto. Todavia, é possível haver contrariedade de efeitos esperados entre todos os casos observados. Isso faz surgir incerteza a respeito dos acontecimentos e leva o pesquisador a questionar a natureza e as causas da contrariedade. Em geral, a contrariedade de efeitos transparece uma contrariedade de causas, onde a aparente incerteza resulta da oposição secreta de causas contrárias. Se o pesquisador não consegue identificar outras causas que estejam interferindo no processo, ele se vale do hábito de supor que o futuro se assemelha ao passado. Desta forma, considerando que no passado foi observado que o efeito poderia acontecer ou não, surge a probabilidade fundamentada na incerteza de causa (HUME, 1739).

Uma característica peculiar das probabilidades é que elas são duais, compreendendo tanto a possibilidade de ocorrência de um determinado evento quanto a possibilidade oposta de não ocorrência. Em geral, essas duas expectativas têm iguais chances de ocorrerem, a menos que exista uma causa que justifique o contrário.

# 1.4 DAS GRANDEZAS FÍSICAS E GRANDEZAS DE VALORAÇÃO ECONÔMICA

É importante salientar a distinção entre as grandezas físicas e as grandezas de valoração econômicas. Uma grandeza física é o conceito que descreve qualitativa e quantitativamente as propriedades observadas no estudo da Natureza e das relações dessas variáveis entre si. Toda grandeza física pode ser medida por meio da determinação direta ou indireta da razão entre a grandeza considerada e outra da mesma categoria que, convencionalmente, é tomada como padrão e que recebe o nome de *unidade* da grandeza em questão. As grandezas são consideradas de mesma categoria quando elas podem ser comparadas mutuamente, podendo ser expressas como o produto de um número real (módulo) e a grandeza de referência, denominada *unidade* (BRASIL, 2002). As grandezas físicas podem ser classificadas na forma:

- **Grandezas Escalares**: são completamente especificadas pelo seu módulo e sua unidade de medida;
- Grandezas Vetoriais: são aquelas que para serem completamente caracterizadas, necessitam especificar módulo, direção e sentido dentro de um campo vetorial.

Qualquer grandeza física, ao ser completamente definida, permite a comparação quantitativa de suas medidas, independentemente do local, momento e condições anteriores em que foram feitas e da pessoa que a realizou. Ela representa objetivamente a quantidade verificada para a propriedade medida e não é influenciada pelo comportamento humano.

Grandezas de valoração econômica consistem no valor atribuído aos recursos e bens pelas pessoas, de acordo as preferências e anseios delas. Entende-se por valoração o ato de atribuir valor; isto é, de mensurar qualitativa ou quantitativamente um bem ou

conjunto de bens. Seu resultado é uma representação da realidade, fundamentada na comparação do bem avaliado com padrões e critérios de equivalência (MORAES, 2007).

O valor é um julgamento intangível de cada indivíduo sobre um bem, diante do contexto de excassez ou disponiblidade de recursos monetários e de outras aquisições alternativas. Quando este indivíduo interage com outros membros da sociedade local em negociações, os valores atribuídos por cada indíviduo é consensado, gerando um valor expresso em termos monetários, denominado preço. Portanto, preços são quantidades subjetivas, resultado da interação entre indivíduos da sociedade, do contexto político, social, tecnológico e cultural. Eles estão sujeitos à influência da imagem percebida do produto e das outras pessoas, incentivos, escassez e disponibilidade do bem e de dinheiro e circunstâncias (GWARTNEY et al., 2009).

Apesar das grandezas de valoração econômica serem expressas em termos do produto do valor numérico e a unidade monetária adotada, elas são subjetivas e não podem ser comparadas diretamente com outros valores, a menos, que sejam exatamente nas mesmas condições: mesmo momento, mesmo local, mesmo mercado, mesmos concorrentes, entre outras coisas.

Análises econômicas de um problema são somente válidas para períodos de tempo próximo ao contexto onde foi realizada. A hipótese de que todas as condições de mercado e as condições sócio-econômicas permanecem constantes sempre é invocada para permitir comparações entre cenários. Um procedimento muito utilizado para corrigir os efeitos temporais sobre o dinheiro é por meio de cálculos financeiros, tais como o Valor Presente Líquido (VPL). Devido a subjetividade da valoração dos bens e serviços, deve-se ter cautela em fazer extrapolações sobre resultados de análises econômicas entre cenários de contexto diferente ou quando se usa um mesmo cenário para contextos futuros, pois não há garantia de que a hipótese de identidade das condições seja de fato verdadeira.

#### 1.5 OBJETIVOS DA TESE.

Esta tese apresenta um estudo detalhado sobre como incertezas podem afetar tomadas de decisão em processos de dimensionamento de projetos. Em especial, este trabalho enfoca a influência de incertezas paramétricas sobre o retorno financeiro de

projetos típicos da Engenharia Química. Em geral, os trabalhos anteriores da literatura propõem a avaliação do risco devido às incertezas das variáveis de entrada, quase sempre custos de matérias-primas e preço de venda dos produtos. Este trabalho estima a amplitude da variação de lucro esperado, a partir da delimitação de uma região de confiança do valor esperado dos parâmetros, empregando a metodologia proposta por SCHWAAB *et al.* (2008a), que usa na etapa de estimação de parâmetros o método de otimização por enxame de partículas (*MEP*).

O presente trabalho apresenta a aplicação da metodologia proposta em dois estudos de caso. O primeiro estudo de caso envolve o dimensionamento do volume e o tempo de residência de um reator CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor) para duas reações de primeira ordem em série. Os parâmetros do modelo de reação são estimados pelo MEP a partir de dados pseudoexperimentais. São avaliados os impactos do tipo de distribuição de probabilidade adotada para a incerteza paramétrica e sua variância, da técnica de estimação de parâmetros (por função dos mínimos quadrados ponderados ou por reconciliação de dados) e do uso de um modelo equivocado sobre a região de confiança paramétrica. Por meio da definição da função lucro, é possível calcular o projeto ótimo para cada conjunto de valores de parâmetros situados no interior da região de confiança paramétrica. Para cada projeto, são calculados o desempenho do reator e o lucro esperado para cada conjunto de parâmetros contidos na região de confiança. Os valores máximo e mínimo de lucro esperado para cada projeto expressam o risco de projeto causado pela incerteza paramétrica.

O segundo estudo de caso envolve a aplicação da metodologia proposta em um problema mais complexo, que consiste no dimensionamento de um duto de petróleo e seu sistema de bombeio. É apresentado um elenco composto por quatro petróleos, que constituem a matéria-prima para uma refinaria, sujeita a várias restrições de processamento. A refinaria deve ser suprida com uma mistura de petróleos por meio de um duto ligado a um terminal aquaviário, o qual é projetado de acordo com o cenário de cotações de cada petróleo e preços de venda dos derivados de petróleo. São incluídas no modelo incertezas sobre as cotações de petróleo e de seus derivados. Estas incertezas nas cotações fazem com que a mistura de petróleos que maximiza o lucro seja diferente da usada para definir a condição ótima de projeto. Portanto, o desempenho em termos de vazão do duto será diferente daquela calculada para a condição inicial de projeto. Como no estudo de caso anterior, uma função lucro é definida para o projeto, de forma que o desempenho do duto é traduzido em termos monetários, sendo possível encontrar

uma região de confiança do lucro esperado para o projeto. Através da comparação das regiões de confiança do lucro esperado de projetos possíveis, pode-se estabelecer um critério de escolha sobre qual é o projeto melhor, segundo a avaliação do projetista.

#### 1.6 ESTRUTURA DA TESE.

Esta tese está organizada em 5 capítulos, 8 Apêndices e 11 Anexos. O Capítulo 1 apresenta uma introdução sobre os conceitos de incerteza e de risco. Nesta introdução, discute-se como se originam as incertezas que são classificadas quanto à natureza e à origem delas. Adicionalmente, é discutida é feita a distinção entre grandezas físicas e grandezas de valoração econômica e são apresentados os objetivos da tese.

O Capítulo 2 apresenta a fundamentação teórica do problema de dimensionamento de projetos, bem como as várias metodologias heurísticas e de otimização propostas na literatura para evitar falhas de projeto e garantir que a solução adotada não seja subdimensionada e nem superdimensionada. Neste capítulo, é apresentada a Teoria de Tomada de Decisão, sendo demonstrados alguns importantes teoremas que a suportam. Finalmente, são discutidos os critérios de escolha entre possíveis projetos.

No Capítulo 3, é discutida a relação entre as incertezas paramétricas e as incertezas de projeto, sendo apresentada uma revisão bibliográfica da literatura sobre os procedimentos propostos para tratar este problema. Em seguida, é apresentada a metodologia de geração da região de confiança paramétrica proposta por SCHWAAB *et al.* (2008a), bem como o procedimento para determinação do projeto de robustez máxima e de avaliação dos *trade off*s entre robustez e opotunidade de ganhos maiores.

O Capítulo 4 apresenta o estudo de caso 1, que consiste na aplicação da metodologia propostas no capítulo anterior ao problema de dimensionamento de um reator CSTR para duas reações de primeira ordem em série. Diversos efeitos de variáveis relevantes são estudados e os resultados obtidos são discutidos.

No Capítulo 5 apresenta o estudo de caso 2, que consiste no dimensionamento de um sistema de bombeio de petróleo, em que existem incertezas quanto às cotações para aquisição de quatro tipos de petróleos. Dentre 6 projetos alternativos, pode-se avaliar qual é o mais adequado para o cenário de incertezas apresentado.

No Capítulo 6, são apresentadas as principais conclusões obtidas nesse trabalho e um lista de sugestões para trabalhos futuros.

Os Apêndices I–IV e VI referem-se aos algoritmos implementados pelo autor para efetuar os estudos acima descritos. O apêndice V mostra o resultados obtidos pelo algoritmo de delimitação da região de confiança paramétrica para o problema disposto no Capítulo 4 (Estudo de Caso 1). Os Apêndices VII e VIII apresentam os resultados do dimensionamento obtidos para o problema disposto no Capítulo 5 (Estudo de Caso 2). Nos Anexos A-C, são demonstrados importantes teoremas, que fundamentam a Teoria de Tomada de Decisão. No Anexo D, é provado que existe uma relação matemática entre as incertezas paramétricas e as incertezas sobre o lucro esperado para um projeto. Os Anexos E-G apresentam o procedimento de análise objetiva da qualidade da etapa de estimação de parâmetros segundo SCHWAAB e PINTO (2007).

O Anexo H demonstra a prova para o teorema Berry-Essen, mencionado no Capítulo 4. Finalmente, os Anexos J e K trazem as equações utilizadas para calcular curvas características das bombas de petróleo e para correção do desempenho das bombas, devido ao uso de fluidos com viscosidade diferente da viscosidade de água.

### CAPÍTULO 2

# FUNDAMENTOS SOBRE DIMENSIONAMENTO DE PROJETOS E DA TEORIA DE TOMADA DE DECISÃO

O processo de dimensionamento de projetos é uma das atividades mais fascinantes da Engenharia, por ser um processo de tomada de decisão baseado na ponderação de aspectos multidisciplinares, tais como a avaliação da tecnologia disponível, de aspectos econômicos, de efeitos sobre as pessoas envolvidas e o meio ambiente e da experiência adquirida no passado com outros projetos executados. Este processo engloba a definição de um escopo e de objetivos, a proposta de um projeto conceitual, a discussão e antecipação de falhas catastróficas, o acompanhamento da execução e o monitoramento desta em relação ao andamento planejado, além da avaliação da adequação das premissas adotadas em relação às constatações de desempenho após conclusão do projeto (PETROSKI, 1994).

Durante todas as etapas, o engenheiro é o agente que enumera todo o conhecimento relacionado ao projeto, e que a partir desses dados, toma decisões de correr ou evitar riscos, superdimensionando ou não componentes do projeto. Em função da experiência, o engenheiro pode antever potenciais riscos e o preço a ser pago para minimizá-los. Portanto, pode-se afirmar que o discernimento crítico é a primeira e mais indispensável ferramenta para o projeto de obras de Engenharia, diante das incertezas do mundo real. Em conjunto com as metodologias propostas na literatura, descritas brevemente neste capítulo, o julgamento e o discernimento crítico de um engenheiro permitem avalizar a escolha final dos parâmetros de um projeto (PETROSKI, 1994).

#### 2.1 DISCERNIMENTO CRÍTICO DE ENGENHARIA.

Um dos mais antigos tratados conhecidos sobre o estado da arte de construção greco-romano foi *De Architectura Libri Decem (Dez Livros sobre Arquitetura)*, escrito pelo arquiteto romano Vitrúvio<sup>1</sup> no século I a.C.. Nesta obra, Vitrúvio já enfatizava a importância do discernimento e do julgamento do engenheiro para a concepção de um projeto, principalmente quando busca soluções já usadas com sucesso no passado (PETROSKI, 1994).

Erros podem ocorrer em todos os estágios do processo de dimensionamento de projetos; porém, erros cometidos no estágio conceitual são difíceis de serem percebidos. Usualmente, tais erros tendem a se manifestar somente quando um protótipo ou planta piloto é testado, acarretando consequências inesperadas e desastrosas. Erros conceituais são invariavelmente erros humanos, pois o desenho conceitual origina-se da capacidade humana de expressar, por meio da atividade criativa, conceitos particulares da mente do engenheiro. Estes conceitos podem ser compartilhados e modificados por outros seres humanos. A ação de criar e projetar é o resultado de ideias não-verbais colocadas na forma de esboços, desenhos ou palavras. Se o conceito é fundamentalmente falho, isto pode ser detectado intuitivamente no instante em que está sendo formulado na mente ou sendo colocado no papel. O conceito então pode ser modificado ou até mesmo abandonado (PETROSKI, 1994).

Todo o processo de dimensionamento de projeto é evolucionário. Ao ser detectada uma falha de projeto ou dificuldade para sua execução ao longo de qualquer uma de suas etapas, todas as etapas anteriormente completadas devem ser revisitadas, pois alterações idealizadas para contornar uma falha podem causar ou deflagrar outras falhas piores ou mais danosas do que a falha inicial (PETROSKI, 1994).

A análise criteriosa de falhas presta um grande serviço ao depurar possíveis falhas de projeto, permitindo que o engenheiro anteveja as falhas e crie folgas propositais para acomodar incertezas. Os fracassos de projetos do passado são mais instrutivos do que os projetos bem-sucedidos, uma vez que é possível observar os fatos e tirar conclusões sobre as causas básicas do erro e sobre como evitá-las. Projetos bem-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Marcus Vitruvius Pollio (c.Século I a.C) arquiteto romano célebre pela autoria do tratado *De Architectura Libri Decem*, do qual pouco se sabe além de que dedicou a obra ao Imperador Otávio Augusto (c. 31-25 a.C). Alguns manuscritos sobreviveram a Idade Média e foram redescobertos durante a

sucedidos fazem com que o engenheiro não se questione sobre possíveis falhas latentes, que podem estar encobertas por causas de condições internas e externas que favorecem a sua atenuação ou diminuir o impacto de consequências. Estas falhas latentes podem ser deflagradas por uma combinação de fatores, que isolados não causariam nenhum risco, que ocorrem simultaneamente em condições limites, desencadeando graves consequências (PETROSKI, 1994).

Todo projeto é conduzido em um estado de relativa ignorância sobre o completo comportamento do sistema a ser projetado, principalmente em sistemas que envolvem interações complexas e inter-relacionadas de fatores biológicos, físico-químicos, elétricos, térmicos e suas implicações. Enquanto houver problemas não solucionados pelas Ciências de Engenharia, não existirão ferramentas suficientes para calcular e predizer teoricamente todos os possíveis efeitos durante a elaboração de projeto, sem lançar mão do expediente dos fatores de segurança (ou, melhor, de ignorância). À medida que os sistemas tornam-se mais sofisticados, o julgamento de todas as variáveis relevantes também torna-se mais desafiante, dado que o balanço de prioridades fica mais intrincado e deve atender objetivos em muitos casos conflitantes. O advento de supercomputadores tem facilitado cálculos complexos, mas os resultados obitdos são tão satisfatórios quanto as teorias que fundamentam os cálculos. Mesmo a mais rigorosa das teorias pode ser apenas tão completa quanto o embasamento físico em que foi fundamentada e interpretada (PETROSKI, 1994).

É papel do julgamento, por meio do discernimento crítico de Engenharia, identificar os elementos chaves a serem focados durante o projeto, separando os detalhes relevantes dos detalhes insignificantes e ponderando a priorização de bens intangíveis, tais como a qualidade, a ética, a segurança, a estética, o posicionamento frente a sociedade e o mercado, dentre outros. Certamente, este papel não pode ser substituído por nenhum método computacional (PETROSKI, 1994).

## 2.2 FATORES DE SEGURANÇA

Todo cálculo de engenharia pode ser, na realidade, comparado a um cálculo de falha. Qualquer quantidade calculada apenas tem significado em Engenharia quando pode ser comparada com um valor que representa uma restrição de projeto ou um limite para evitar falhas de alguma espécie. Por exemplo, definir a pressão de operação *P* de

um vaso faz apenas sentido se a pressão P é menor do que a pressão máxima de operação do equipamento  $P_{max}$  na condição limite de ruptura dele. De fato, um fator de segurança somente pode ser calculado dentro de um contexto explícito de uma falha, sendo assim importante o estudo nas condições críticas próximas das falhas.

Engenheiros sempre convivem com os limites impostos pelas fronteiras do conhecimento e pela lacuna de conhecimento, para tornar possível o projeto sem qualquer incerteza e, conseqüentemente, sem necessidade de usar fatores de segurança (PETROSKI, 1994).

Um caso paradigmático sobre a importância dos fatores de segurança foi o do engenheiro construtor de pontes no século XIX, John Roebling<sup>2</sup>. Ele era um prolífico estudioso de falhas em pontes construídas anteriormente e se estabeleceu como um confiável construtor de pontes suspensas por cabos de aço nos Estados Unidos, que foi pioneiro no uso desta tecnologia. Antes dele, já haviam sido projetadas diversas pontes suspensas por correntes de ferro forjado na Grã-Bretanha e todas haviam falhado em condições de fortes ventos, que as faziam oscilar até a ruptura das correntes. Como exemplo, pode-se citar o píer suspenso por correntes de Brighton, balneário localizado no sul da Inglaterra, construído por volta de 1830 e que foi seriamente danificada por tempestades em 1833 e 1836. Os engenheiros britânicos desse período tornaram-se céticos em relação à integridade de pontes suspensas em temporais e o emprego dela como ponte para passagem de locomotivas (PETROSKI, 1994). Roebling percebeu que, ao analisar as mencionadas falhas, se usasse cabos de aço suficientemente fortes, evitaria que a estrutura da ponte oscilasse ou torcesse por meio de ancoragem por estais, tornando as pontes suspensas tão seguras quanto qualquer outra ponte para passagem de locomotivas, mesmo nas piores condições de tempestade (PETROSKI, 1994).

Uma clara evidência da preocupação de Roebling em relação a fatores de segurança surgiu com o colapso da ponte suspensa de 308 m de vão livre de Wheeling, Estados Unidos, projetada por Charles Ellet Jr. Em 1847, tanto Roebling quanto Ellet submeteram propostas para a construção de uma ponte sobre o Rio Ohio em Wheeling, West Virginia. O projeto leve e estreito com 308 m de Ellet foi escolhido, em

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> John Augustus Roebling (1806-1869) engenheiro e construtor de pontes alemão, naturalizado norteamericano. Formou-se na Prússia e emigrou para os Estados Unidos em 1823. Iniciou um negócio pioneiro de fabricação de cabos de aço e posteriormente se estabeleceu como um respeitado construtor de pontes suspensas. Construiu diversas pontes em todo o território norte-americano. Sua obra mais famosa foi a Ponte do Brooklyn em Nova Iorque. Morreu em decorrência de um acidente que sofreu durante inspeções iniciais do local da obra. A obra foi tocada pelo seu filho Washington e posteriormente pela sua nora Emily até sua conclusão em 1883 (ROEBLING, 2009).

detrimento à proposta mais conservadora de Roebling. A ponte foi concluída em 1849 e era considerada então a mais longa do mundo. Cinco anos mais tarde, em Maio de 1854, o corpo da ponte Wheeling sofreu fortes ondulações durante uma violenta tempestade até colapsar totalmente (PETROSKI, 1994). Neste ínterim, Roebling havia vencido uma licitação para construir uma ponte para linha férrea sobre o Niagara Falls, na fronteira entre os Estados Unidos e o Canadá, e surgiu naturalmente o questionamento da opinião pública em relação à segurança da ponte que se encontrava em construção. Roebling conseguiu convencer os financiadores que o seu projeto havia se antecipado às falhas por vibração por meio da ancoragem do corpo da ponte e do uso de um fator de segurança alto, em relação à tensão crítica de ruptura para os cabos de aços principais (PETROSKI, 1994). A ponte sobre o Niagara Falls projetada por Roebling foi inaugurada em 1855 e operou sem nenhum problema até a sua demolição, para a construção de uma ponte maior, em 1877 (BERKETA, 2010).

Entretanto, a maior obra projetada por Roebling foi a ponte do Brooklyn, com 1.825 m de extensão, ligando a Ilha de Manhattan ao bairro do Brooklyn, em Nova Iorque. A obra foi construída postumamente pelo seu filho Washington Roebling e sua nora entre 1869 e 1883. No relatório sobre o andamento da construção de 1877, Washington Roebling descreveu que foi usado um fator de segurança de 6 para o dimensionamento dos cabos principais, para garantir a integridade da obra, mesmo diante da incerteza sobre os efeitos dos ventos e da corrosão, que ocorreria ao longo dos anos (PETROSKI, 1994). A ponte do Brooklyn encontra-se aberta ao tráfego de automóveis e pedestres até os dias de hoje.

A estratégia de estabelecer fatores de segurança para itens críticos de um projeto permite contornar riscos. Todavia, a percepção de quão cauteloso deve-se ser e do custo resultante somente pode ser avaliada, plenamente, após a conclusão do projeto. Neste caso, os projetos pioneiros apresentam, normalmente, fatores de segurança mais altos, enquanto em projetos subsequentes, os projetistas se arriscam mais, diminuindo os fatores de segurança. Em algum momento um outro projetista, a partir de informação parcial de um projeto concluído, pode dimensionar de forma descuidada um futuro projeto e ocorrer uma falha, que acarreta no aumento dos fatores de segurança nos próximos projetos. Isso demonstra que o estabelecimento de fatores de segurança é uma atividade evolucionária e cíclica ao longo do tempo.

## 2.3 REGRAS HEURÍSTICAS (Rules of Thumb)

Regras heurísticas (*rules of thumb*) são valores numéricos ou sugestões consideradas como razoáveis para um projeto, baseadas essencialmente na experiência prévia. Essas regras são baseadas em observações obtidas da experiência prática. Seu objetivo não é substituir teorias fundamentais, mas enriquecer o uso correto das teorias fundamentais para resolver problemas. As regras heurísticas apresentam as seguintes aplicações (WOODS, 2007):

- Ajudar a julgar se uma resposta é factível;
- Permitir verificar rapidamente as hipóteses aplicadas num cálculo de engenharia;
- Guiar uma melhor compreensão sobre sistemas e situações complexas;
- Permitir estimar rapidamente a ordem de grandeza de variáveis críticas para o projeto.

Normalmente, as regras heurísticas são compiladas em livros técnicos especializados, baseados na vasta experiência em projetos, sendo apresentadas na forma de tabelas, faixas de valores admissíveis, gráficos e ábacos (BRANAN, 2005; WOODS, 2007).

# 2.4 DIMENSIONAMENTO POR OTIMIZAÇÃO

Para sistemas muito complexos, a quantidade de configurações possíveis para o dimensionamento de um projeto cresce dramaticamente. A decisão sobre qual deve ser a melhor configuração, dentre um conjunto de configurações factíveis, torna-se difícil, à medida em que se aumenta o número de objetivos perseguidos, muitos deles contraditórios entre si.

Nas últimas décadas, as tendências sociais, políticas e econômicas promoveram uma ênfase no dimensionamento de projetos de novos processos, havendo demanda por aumento da eficiência energética, endurecimento das exigências legais para minimização dos impactos ambientais e de riscos à segurança operacional e maior preocupação com o controle de qualidade total ao longo da cadeia de processo (CIRIC e JIA, 1994). Em decorrência dessas demandas, impulsionou-se a intensificação das

técnicas de monitoramento e controle de processos e a necessidade de lidar efetivamente com incertezas, tais como variações da qualidade das matérias-primas, dos níveis de produção, das condições ambientes, das correntes do processo, da atividade de catalisadores, da eficiência de equipamentos (trocadores de calor e bombas), entre outros (GROSSMANN *et al.*, 1983; PISTIKOPOULOS e GROSSMANN, 1988).

GROSSMANN et al. (1983) e MORARI (1983) propuseram, originalmente, que a tarefa de dimensionamento de projetos fosse definida como um problema de otimização multiobjetivo. Este método expandiu os horizontes dos problemas de dimensionamento de processos de Engenharia, por meio do estabelecimento de taxas de troca (trade offs) entre diferentes objetivos conflitantes, auxiliando o processo de tomada de decisão. A formulação do problema de otimização requer uma modelagem intensiva do processo, dos efeitos das incertezas e do lucro líquido associado à cada condição simulada.

Relacionado ao problema multiobjetivo, foram propostas diversas estruturas para a construção das funções objetivos e ordenação dos critérios adotados. GROSSMANN et al. (1983) introduziu o conceito de flexibilidade como a medida de quanto o processo permanece em regiões factíveis de operação diante de flutuações aleatórias de variáveis. MORARI (1983) propôs o conceito de resiliência, que consiste na habilidade de um processo para mover-se rápida e suavemente de uma condição operacional para outra, incluindo condições de partida (start up) e de parada (shut down). DOERING e GADDY (1979) apresentaram o conceito de dependabilidade, que consiste numa medida da frequência de conformidade de um processo para satisfazer um conjunto de critérios de desempenho. Para períodos de operação discretos em estado estacionário, a dependabilidade é dada por:

$$D = \frac{N_s}{N_T} \tag{2.1}$$

onde D é a dependabilidade,  $N_s$  é o número de vezes em que o projeto satisfaz a todos os critérios de desempenho e  $N_T$  é o número total de observações. Outro conceito importante é a *robustez*, que consiste na insensibilidade do processo à ocorrência de incertezas (BERNARDO *et al.*, 2003). A partir das métricas mencionadas, foram propostas as seguintes formulações do problema de otimização multiobjetivo:

• **Problema com Grau de Flexibilidade Fixo**: É uma abordagem mais simplificada do problema, no qual o grau de flexibilidade do processo é fixado *a priori*, a função objetivo é construída de forma a encontrar a configuração do

sistema que maximize o lucro líquido ou minimize custo total do processo e que satisfaça uma lista de restrições. A fonte de variabilidade pode ser concentrada nas variáveis de entrada do modelo determinístico (sem incertezas nos parâmetros) (DOERING e GADDY, 1979) ou admitindo que certos parâmetros do modelo são incertos, juntamente com as variáveis de entrada (GROSSMANN et al., 1983);

- Problema com Grau de Flexibilidade Ótimo: problema multiobjetivo que estabelece um taxa de troca (trade off) entre o custo do processo e o grau de flexibilidade. A função objetivo deve apresentar restrições para garantir soluções factíveis e deve penalizar o custo do processo quando não houver solução factível. O grau de flexibilidade pode ser definido como o máximo comprimento do hipercubo que pode ser contido pela região de soluções factíveis (GROSSMANN et al., 1983; PISTIKOPOULOS e GROSSMANN, 1988). A metodologia proposta por CIRIC e JIA (1994) utiliza um procedimento para estimação da curva de sensibilidade de trade off gerado a partir do conjunto de soluções não-inferiores (conjunto de Paretto) e pode ser estendida para modelos não lineares. No entanto, não é possível definir qual é a melhor solução dentre as possíveis soluções existente na curva de trade off. Para isso, é necessário associar um problema de tomada de decisão para que seja possível julgar o compromisso mais adequado entre o custo do processo 0 superdimensionamento relacionado com o grau de flexibilidade ótimo.
- Problema com robustez e variabilidades controladas: BERNARDO et al. (2003) propuseram uma formulação de função objetivo que relaxa restrições de qualidade para calcular o desempenho do processo. A perda de qualidade é penalizada por meio da função perda de Taguchi (BERNARDO et al., 2003). É determinado o trade-off entre a robustez e a lucratividade do processo. Da mesma forma que no caso anterior, deve-se tomar, posteriormente, a decisão do quanto se pode aceitar de robustez em troca de perda de lucratividade.

## 2.5 MÉTODOS E ESTRATÉGIAS DA TEORIA DE TOMADA DE DECISÃO

Os problemas de otimização multiobjetivo irremediavelmente levantam a discussão sobre a ordem de priorização dos objetivos e sobre quão flexível se pode ser

ao privilegiar um aspecto ótimo em troca da subotimização de outros aspectos do resultado global esperado. As possibilidades de obter soluções a partir do ordenamento diferenciado da preferência dos objetivos podem ser inúmeras.

A Teoria de Tomada de Decisão foi originalmente desenvolvida porque os indivíduos estão frequentemente insatisfeitos com as escolhas que eles fazem e encontram dificuldade de determinar qual a escolha que melhor reflete as verdadeiras preferências que têm. Tomadas de decisão sem uma estratégia ou metodologia apresentam freqüentemente inconsistências, subjetividades e escolhas subótimas, particularmente quando há complexos *trade offs* em ambiente de incertezas (THURSTON, 2006). Para remediar estes problemas, von NEUMANN e MORGENSTERN (1947) postularam um conjunto de axiomas racionais para fundamentar a modelagem matemática das preferências de um tomador de decisão consistente, racional e imparcial, de tal forma a identificar a melhor opção que poderia ser escolhida. A referida função matemática que descreve a preferência de um tomador de decisão é denominada função *utilidade*. Os axiomas são enumerados abaixo (THURSTON, 2006):

- Axioma 1: Completude da ordem. Significa que as preferências do tomador de decisão existem e que ele consegue expressá-las. Por exemplo: se X é preferido a Y, pode ser representado por X ≻ Y. Se o tomador de decisão é indiferente às diferenças existentes entre X e Y, então deve ser representado por X ~ Y.
- Axioma 2: Transitividade. A lista ordenada de preferências do tomador de decisão deve ser transitiva. Dessa forma,

se 
$$X \succ Y$$
 (2.2)   
e  $Y \succ Z$  então  $X \succ Z$ 

• Axioma 3: Monotonicidade. A preferência do tomador de decisão sobre um atributo deve crescer ou decrescer monotonicamente numa faixa considerada. Ou seja, qualquer quantidade maior de um atributo sempre será preferida a um menor, ou vice-versa. Não deve haver um ponto de inflexão ou de inversão do sinal das derivadas da medida de preferência, no intervalo em estudo.

A função utilidade proposta originalmente por von NEUMANN e MORGENSTERN (1947) quantifica o desejo de fazer trocas entre atributos por meio de

probabilidades. Os seguintes axiomas permitem estruturar a função utilidade em termos de probabilidades (THURSTON, 2006):

- Axioma 4: Probabilidades existem e podem ser quantificadas. Este é o principal postulado que garante o emprego do conceito de probabilidade para formular um modelo probabilístico de incertezas. Probabilidades discretas podem ser empregadas, bem como distribuições de probabilidades contínuas;
- Axioma 5: Monotonicidade da Probabilidade. O tomador de decisão sempre prefere um resultado que apresenta uma chance maior de sucesso a outro de menor chance.
- Axioma 6: Substituição-Independência. Se X ~Y, então X e Y podem ser substituídos um pelo outro em qualquer decisão sem alterar a ordenação das alternativas. Uma das implicações é que o grau de preferência do tomador de decisão para resultados é linear com as probabilidades. Por exemplo, se um tomador de decisão deseja pagar \$X por uma aposta 50/50, então ele deveria pagar apenas \$X/2 se as chances de vencer forem reduzidas para 25%. Note que isto não implica que as preferências são lineares em relação ao nível de atributos, mas é somente linear em relação à probabilidade.

Apesar dos problemas multiobjetivos permitirem inúmeras possibilidades de soluções, pode-se reduzir pragmaticamente a busca dessas soluções com auxílio de apenas duas estratégias distintas. BERNARDO et al. (2003) apresentam um exemplo para explicar estas estratégias. A primeira estratégia baseia-se no critério max-min lucro, que direciona o tomador de decisão a escolher a opção que maximize o mínimo lucro que pode acontecer dentre os vários cenários possíveis. Este é um critério pessimista e conservador, que protege o tomador de decisão contra o pior caso que potencialmente pode ocorrer. A segunda estratégia baseia-se no critério min-max arrependimento (ou desperdício de oportunidade), no qual o arrependimento é computado como a diferença entre o lucro que poderia ter sido obtido caso não houvesse incertezas, e o lucro realizado em uma dada condição, em que estão presentes as incertezas. O arrependimento também pode ser interpretado como o valor da informação perfeita (VIP) acerca dos eventos futuros. O VIP é calculado como a diferença entre os dois modelos extremos de comportamento em relação a incertezas futuras: o modelo espere-e-veja, em que a decisão é tomada depois da concretização da

incerteza; e o modelo *aqui-e-agora*, em que a decisão é tomada antes da concretização da incerteza (BERNARDO *et al.*, 2003).

O processo de dimensionamento de projeto por otimização em ambientes de incertezas pode ser representado genericamente por:

Otimizar<sub>d,z,x</sub> 
$$\Phi[f(d, z, x, \theta)]$$
 (2.3)  
Sujeito a  $h(d, z, x, \theta) = 0$   
 $g(d, z, x, \theta) \le 0$   
 $d \in D, z \in Z, x \in X, \theta \in \Theta$ 

onde d, z e x são vetores de variáveis de projeto, controle e de estado, respectivamente,  $\theta$  representa o vetor de parâmetros de incerteza no domínio  $\Theta$ , h e g são equações e inequações de restrições do processo. O critério de tomada de decisão é definido para permitir a otimização de  $\Phi$ , onde  $\Phi$ é uma função do escalar f que define uma métrica de desempenho do processo, o qual é geralmente um indicador econômico. Os critérios de otimização usuais são os seguintes (BERNARDO et al., 2003):

- max-min do desempenho  $max_d min_\theta f_1(d, \theta)$ ;
- $min-max \ VIP$   $min_d \ max_\theta \ VIP[f_1(d,\theta)];$
- max desempenho esperado  $max_d E_\theta [f_1(d,\theta)];$
- min VIP esperada  $min_d E_\theta \{ \text{VIP}[f_1(d,\theta)] \};$

sendo VIP $(d, \theta) = f_2(\theta) - f_1(d, \theta)$ , onde  $f_2(\theta)$  é o desempenho do processo nas condições em que as variáveis de projeto foram escolhidas, de acordo com decisões "espere e veja", tal que (BERNARDO et al., 2003):

$$f_{2}(\theta) = \max_{d,z, x} f(d, z, x, \theta)]$$
Sujeito a 
$$h(d, z, x, \theta) = 0$$

$$g(d, z, x, \theta) \leq 0$$

$$d \in D, z \in Z, x \in X, \theta \in \Theta$$

$$(2.4)$$

onde  $f_2(\theta)$  é o máximo lucro possível e  $f_1(d,\theta)$  é definido como:

$$f_{1}(d,\theta) = \max_{z, x} f(d, z, x, \theta)]$$
Sujeito a
$$h(d, z, x, \theta) = 0$$

$$g(d, z, x, \theta) \leq 0$$

$$d \in D, z \in Z, x \in X, \theta \in \Theta$$

$$(2.5)$$

e o operador esperança aplicado a uma função escalar f é expressa por meio de uma integral de n dimensões de parâmetros incertos, ponderada pela função densidade de probabilidade  $j(\theta)$ :

$$E_{\theta}(f) = \int_{\Theta} f(\theta)j(\theta)d\theta \tag{2.6}$$

A abordagem probabilística de modelos de incerteza para tomada de decisão, tal como proposto pela função utilidade de von Neumann-Morgenstern, não é bem sucedida porque há casos em que o ambiente de incertezas não fornece dados suficientes para permitir uma análise probabilística. BEN-HAIM (2000) propôs uma abordagem não probabilistica para descrever incertezas denominado *modelo de falta de informação* (*info-gap model*). Os vetores de grandezas incertas são expressas, nesse caso, a dois níveis pelo modelo de falta de informação. Para um escalar fixo o conjunto  $C(\alpha, \tilde{v})$  representa a amplitude da variabilidade de uma quantidade incerta v em torno do ponto central  $\tilde{v}$ . Quanto maior o valor de  $\alpha$ , maior a faixa de variação entre o que é conhecido ( $\tilde{v}$  e a estrutura do conjunto de valores possíveis) e o que é preciso conhecer para que se obtenha uma solução ideal (o valor exato de v). O valor de v0 e geralmente desconhecido, constituindo o segundo nível de incerteza: a amplitude de variação da incerteza é ilimitada. Modelos de falta de informação devem obedecer a quatro propriedades definidas pelos seguintes axiomas (BEN-HAIM, 2000):

- **Hierarquia**: Um conjunto de amplitude menor está sempre contido em outro de maior amplitude  $C(\alpha, \tilde{v}) \subseteq C(\alpha', \tilde{v})$  se  $\alpha \leq \alpha'$ ;
- Contração: C(0, 0) é conjunto unitário  $\{0\}$ ;
- Translação:  $C(\alpha, \tilde{v})$  pode ser obtido pela translação do conjunto  $C(\alpha, 0)$  da origem até o ponto  $\tilde{v}$ ;
- Expansão linear: Modelos de falta de informação centrados na origem podem ser expandidos linearmente, de maneira que  $\mathcal{C}(\beta,0) = \left(\frac{\beta}{\alpha}\right) \mathcal{C}(\alpha,0)$  para todo  $\alpha$ ,  $\beta > 0$ .

BEN-HAIM (2000; 2006) definiu a função escalar *recompensa*  $R(q, \upsilon)$  para expressar o grau de sucesso da ação executada pelo tomador de decisão q em ambiente de incerteza em relação à variável  $\upsilon$ . A fução recompensa normalmente apresenta dimensão de unidades monetárias ou outra que meça o desempenho do processo. A partir da definição de recompensa, foi formulado o conceito de estratégia robusta, por meio da definição da grandeza *robustez*. Robustez é o maior valor do parâmetro de incerteza para o qual a recompensa não é menor do que um mínimo aceitável ou valor crítico  $r_c$ . O conjunto de valores de  $\alpha$  com recompensa maior do que a recompensa crítica é dado por:

$$\mathbf{A}(q, r_c) = \left\{ \alpha : \min_{\upsilon \in \ell(\alpha, \tilde{\upsilon})} R(q, \upsilon) \ge r_c \right\}$$
(2.7)

A função robustez é definida como:

$$\hat{\alpha}(q, r_c) = \max_{\alpha \in A(q, r_c)} \alpha \tag{2.8}$$

Se o conjunto  $\mathbf{A}(q,r_c)$  é vazio, então a recompensa  $r_c$  não pode ser alcançada a nenhum nível de incerteza, de maneira que  $\hat{\alpha}(q,r_c)=0$ . Quando  $\hat{\alpha}(q,r_c)$  é grande, o tomador de decisão é imune a uma ampla faixa de variação. Se  $\hat{\alpha}(q,r_c)$  é pequeno, mesmo pequenas flutuações podem levar a recompensa ser menor do que  $r_c$ .

A estratégia de robustez ótima do tomador de decisão é obtida quando ele escolhe uma ação  $\hat{q}_c(r_c)$  que maximiza a robustez (BEN-HAIM, 2000):

$$\hat{\alpha}(\hat{q}_c(r_c), r_c) = \max_{q \in Q} \hat{\alpha}(q, r_c)$$
(2.9)

onde Q é o conjunto de ações possíveis.

A função oportunidade  $\hat{\beta}$  é construída de uma maneira similar a  $\hat{\alpha}$ . Seja  $r_w$  a recompensa que representa o desejo mais otimista do tomador de decisão, muito maior do que a recompensa crítica  $r_c$  necessária para a sobrevivência do negócio. Tanto  $r_w$  quanto  $r_c$  devem ser arbitrados pelo tomador de decisão, conforme a sua percepção de

risco e atratividade pela recompensa. Seja o conjunto de valores de parâmetros de incerteza, cujas recompensas sejam maiores do que  $r_w$  (BEN-HAIM, 2000):

$$\mathsf{B}(q, r_{_{\boldsymbol{w}}}) = \left\{ \alpha : \max_{\boldsymbol{v} \in \ell(\alpha, \tilde{\boldsymbol{v}})} R(q, \boldsymbol{v}) \ge r_{_{\boldsymbol{w}}} \right\}$$
 (2.10)

 $B(q, r_w)$  é análogo ao conjunto  $A(q, r_c)$ , definido pela Equação (2.7). A função oportunidade é definida como o mínimo valor do parâmetro de incerteza  $\alpha$ , cuja máxima recompensa possível é maior do que  $r_w$ .

$$\hat{\beta}(q, r_w) = \min_{\alpha \in B(q, r_w)} \alpha \tag{2.11}$$

Se o conjunto  $\mathbf{B}(q,r_w)$  é vazio, então a recompensa  $r_w$  não pode ser alcançada a nenhum nível de incerteza, de maneira que  $\hat{\beta}(q,r_w) = \infty$ . Se  $\hat{\beta}(q,r_w)$  é pequeno, então pequenos desvios das condições nominais podem levar a recompensas maiores do que  $r_w$ . Por outro lado, se  $\hat{\beta}(q,r_w)$  é grande, então a recompensa máxima tão significativa quanto  $r_w$  podem ocorrer apenas para grandes desvios da condição normal. Para qualquer valor da maior aspiração do tomador de decisão  $r_w$ , um valor de  $\hat{\beta}(q,r_w)$  pequeno é desejável ao valor grande. Portanto, quanto menor o valor de  $\hat{\beta}(q,r_w)$ , melhor. A função oportunidade  $\hat{\beta}(q,r_w)$  e a função robustez  $\hat{\alpha}(q,r_c)$  são funções de imunidade, sendo  $\hat{\alpha}(q,r_c)$  uma função de imunidade à falha intolerável e  $\hat{\beta}(q,r_w)$  uma função de imunidade ao sucesso avassalador. Ao invés de maximizar as imunidades a falhas, tal como apresentado na Equação (2.9), o tomador de decisão pode escolher a estratégia que minimiza a imunidade à oportunidade. Neste caso, a estratégia de oportunidade ótima é definida como (BEN-HAIM, 2000):

$$\hat{\beta}(\hat{q}_w(r_w), r_w) = \min_{q \in Q} \hat{\beta}(q, r_w)$$
(2.12)

onde Q é o conjunto de ações possíveis.

Deve-se notar que as funções de imunidade aqui apresentadas são obtidas pela combinação de três elementos distintos: um modelo do sistema, requerimentos de desempenho e um modelo de incertezas. Uma análise de falta de informação inicia-se com estes três componentes (BEN-HAIM, 2006).

- Modelo do sistema. A função recompensa R(q, υ) expressa a estrutura da relação entre variáveis de entrada e variáveis de saída, sobre o qual as decisões são aplicadas. Representa a resposta do sistema em termos de recompensa ou em alguma métrica de desempenho, no qual o tomador de decisão escolhe a ação q diante de um ambiente de incerteza υ.
- Requerimentos de desempenho. Consiste nas restrições de desigualdade mostradas nas Equações (2.7) e (2.10) que expressam o nível de desempenho esperado pelo tomador de decisão. Representa os requerimentos mínimos que o tomador de decisão tem em relação ao desempenho do sistema na tomada da melhor decisão.
- Modelo de Incertezas. Consiste nos modelos de falta de informação, nos quais são delineados os limites do conhecimento e as amplitudes de variação possíveis das variáveis incertas.

De forma similar aos métodos de dimensionamento de projetos propostos anteriormente, as funções de imunidade que denotam os dois alvos possíveis de serem perseguidos durante o processo de tomada de decisão são: a busca pela robustez e a busca de sucessos acima das expectativas médias. Quando se tenta trabalhar com estratégias intermediárias entre estes dois extremos, obtém-se uma vez mais a dificuldade de julgamento de *trade offs* inerente aos problemas de otimização multiobjetivo. BEN-HAIM (2000) demonstrou uma série de teoremas que elucidam uma metodologia de julgamento do *trade offs*. Tais teoremas são conhecidos como Teoremas do Apostador. O primeiro teorema expressa o *trade off* entre a recompensa mínima demandada pelo tomador de decisão e a robustez  $\hat{\alpha}(q, r_c)$  associada a uma certa ação q, conforme enunciado que segue e cuja prova encontra-se no Anexo A.

**Teorema 2-1.** Sejam  $C(\alpha, \tilde{v})$  um modelo de falta de informação, R(q, v) uma furção recompensa uniformemente contínua e  $r_1$  e  $r_2$  dois valores de recompensa, tal que  $r_1 < r_2$ . Se  $\hat{\alpha}(q, r_1)$  e  $\hat{\alpha}(q, r_2)$  existem e são positivos para  $C(\alpha, \tilde{v})$ , então:

$$\hat{\alpha}(q, r_1) > \hat{\alpha}(q, r_2) \tag{2.13}$$

A função robustez é estrita e monotonicamente decrescente no conjunto de recompensas factíveis, bem como a estratégia de robustez ótima, conforme demonstrado pelo Corolário 2-1 (vide prova do corolário no Anexo A).

**Corolário 2-1**. Sejam  $C(\alpha, \tilde{v})$  um modelo de falta de informação, R(q, v) uma função recompensa uniformemente contínua, e  $r_1$  e  $r_2$  dois valores de recompensa, tal que  $r_1 < r_2$ . Sejam  $\hat{q}_c(r_1)$  e  $\hat{q}_c(r_2)$  as estratégias robustas ótimas correspondentes. Então:

$$\hat{\alpha}(\hat{q}_c(r_1), r_1) > \hat{\alpha}(\hat{q}_c(r_2), r_2) \tag{2.14}$$

O Teorema 2-1 e seu corolário demonstram francamente o *trade off* existente entre recompensa e imunidade a incerteza. O tomador de decisão deve escolher seu posicionamento sobre esse aspecto. O teorema também mostra que o tomador de decisão não precisa fazer uma escolha *a priori* irrevogável de recompensa crítica  $r_c$ . Em lugar disso, pode-se adotar um  $r_c$  e verificar a robustez correspondente, à luz das incertezas presentes. O tomador de decisão talvez possa demandar uma recompensa crítica maior, em troca de uma pequena redução de robustez em relação à condição inicial, de tal forma que não afete a imunidade às incertezas do sistema. Por analogia, chega-se ao Teorema e Corolário 2-2 para a função de imunidade oportunidade  $\hat{\beta}$ , cujas provas são apresentadas no Anexo B (BEN-HAIM, 2000).

**Teorema 2-2.** Sejam  $C(\alpha, \tilde{v})$  um modelo de falta de informação, R(q, v) uma furção recompensa uniformemente contínua, e  $r_1$  e  $r_2$  dois valores de recompensa, tal que  $r_1 < r_2$ . Se  $\hat{\beta}(q, r_1)$  e  $\hat{\beta}(q, r_2)$  existem e são positivos para  $C(\alpha, \tilde{v})$ , então:

$$\hat{\beta}(q, r_1) < \hat{\beta}(q, r_2) \tag{2.15}$$

A função oportunidade é estrita e monotonicamente decrescente no conjunto de recompensas factíveis, bem como a estratégia de oportunidade ótima, conforme demonstrado pelo Corolário 2-2 (vide prova do corolário no Anexo B).

**Corolário 2-2.** Sejam  $C(\alpha, \tilde{v})$  um modelo de falta de informação, R(q, v) uma furção recompensa uniformemente contínua, e  $r_1$  e  $r_2$  dois valores de recompensa, tal que  $r_1 < r_2$ . Sejam  $\hat{q}_w(r_1)$  e  $\hat{q}_w(r_2)$  as estratégias robustas ótimas correspondentes. Então:

$$\hat{\beta}(\hat{q}_{w}(r_{1}), r_{1}) > \hat{\beta}(\hat{q}_{w}(r_{2}), r_{2}) \tag{2.16}$$

O Teorema 2-3 e os respectivos Corolários 2-3 a 2-5 elucidam vários aspectos de quantificação e interpretação das medidas de sensitividade ao risco (BEN-HAIM, 2000). A prova do Teorema 2-3 é apresentada no Anexo C.

**Teorema 2-3**. Dados dois tomadores de decisão com o mesmo conjunto de ações factíveis Q, com as funções recompensas uniformemente contínuas  $R_1(q,v)$  e  $R_2(q,v)$ , com os modelos de falta de informação sobre as incertezas  $C_1(\alpha,\tilde{v})$  e  $C_2(\alpha,\tilde{v})$  e com funções robustez finitas  $\hat{\alpha}_1(q,r)$  e  $\hat{\alpha}_2(q,r)$ . Se

$$(1+\delta)R_1(q,\upsilon) \le R_2(q,\upsilon) \tag{2.17}$$

para qualquer  $\delta \ge 0$  e para todo  $q \in Q$  e para todo v dentro da faixa dos modelos de falta de informação, e se

$$C_2[(1+\varepsilon)\alpha,\widetilde{\upsilon}] \subset C_1(\alpha,\widetilde{\upsilon}) \tag{2.18}$$

para qualquer  $\varepsilon \ge 0$  e para todo  $\alpha \ge 0$ , então

$$(1+\varepsilon)\hat{\alpha}_1(q,r) \le \hat{\alpha}_2[q,(1+\delta)r] \le \hat{\alpha}_2(q,r)$$
(2.19)

com designaldade estrita à direita  $\delta e > 0$ , a menos que ambas as funções são identicamente zero.

A Equação (2.19) implica que o tomador de decisão 2 tem maior propensão ao risco do que o tomador de decisão 1:

$$\hat{\alpha}_1(q,r) \le \hat{\alpha}_2(q,r) \tag{2.20}$$

O Teorema 2-3 apresenta dois casos especiais que serão discutidos por meio dos Corolários 2-3, 2-4 e 2-5 (BEN-HAIM, 2000):

 Funções recompensa idênticas e modelos de falta de informação hierarquicamente contidos um no outro;  Funções recompensa diferentes entre si e modelos de falta de informação idênticos.

A extensão do conhecimento acerca de eventos incertos é representado pelo modelo de falta de informação. A relação em que um modelo de falta de informação apresenta mais informação do que outro pode ser expressa pela inserção de um modelo dentro de outro, conforme mostrado pela Equação (2.18). O modelo  $C_2$  é mais informativo do que o modelo  $C_1$  porque os limites de incertezas da primeira são mais estreitas do que a última. Estas constatações levam ao estabelecimento dos corolários que seguem (BEN-HAIM, 2000).

**Corolário 2-3.** A aversão ao risco robusta cresce com a incerteza. Se dois tomadores de decisão têm o mesmo conjunto de ações factíveis, a mesma função recompensa uniformemente contínua e modelos de falta de informação contidos um dentro do outro, como na Equação (2.18), então o tomador de decisão 2 tem uma menor aversão ao risco robusto do que o tomador de decisão 1.

O segundo caso especial do Teorema 2-3 pode ser descrito conforme o Corolário 2-4.

Corolário 2-4. A aversão ao risco robusta descresce com a recompensa. Se dois tomadores de decisão têm o mesmo conjunto de ações factíveis, o mesmo modelo de falta de informação e funções recompensa uniformemente contínuas, uma menor do que a outra, como na Equação (2.17), então o tomador de decisão 2 tem uma menor aversão ao risco robusta do que o tomador de decisão 1.

Outro importante corolário derivado do Teorema 2-3 é o Corolário 2-5, cuja prova é apresentada no Anexo C. O referido corolário estabelece que a maior incerteza do tomador de decisão 1 pode ser compensada por um aumento na recompensa crítica, sendo possível até tornar o tomador de decisão 1 mais propenso ao risco do que o tomador de decisão 2, mesmo com a maior incerteza do primeiro, o que demonstra a grande influência da definição das recompensas críticas sobre a indicação das decisões ou ações mais adequadas (BEN-HAIM, 2000).

**Corolário 2-5.** A incerteza é definida pela recompensa. Dadas as condições fixadas pelo Teorema 2-3, há uma nova função recompensa  $R_1*(q,v)$ , onde  $R_1*(q,v) \ge R_I(q,v)$  e tal que, se  $R_I(q,v)$  é substituído por  $R_I*(q,v)$ , então:

30

$$\hat{\alpha}_{\gamma}(q,r) < \hat{\alpha}_{1}^{*}(q,r) \tag{2.21}$$

onde  $\hat{\alpha}_{1}^{*}(q,r)$  é a função robustez do tomador de decisão 1 baseada na função recompensa  $R_{1}^{*}(q,v)$ .

A partir da definição da métrica de robustez e de oportunidade e as relações demonstradas pelos Teoremas e Corolários, é possível avaliar o *trade off* entre manter a máxima robustez sem perder as possibilidades de lucro acima da expectativa. Esta discussão será retomada no Capítulo 4.

#### 2.6 COMENTÁRIOS FINAIS.

Neste capítulo, o problema de dimensionamento de projetos é discutido, bem como o desafio enfrentado pelos engenheiros de anteciparem-se às possibilidades de falhas. Como ferrramentas, eles se valem da experiência com outros projetos, um bom discernimento e o uso de fatores de segurança para garantir o bom desempenho do empreendimento, após conclusão de seu projeto.

A formulação do problema de dimensionamento de projetos, na forma de um problema de otimização multiobjetivo, tem sido bastante pesquisada, sendo, neste ínterim, propostas várias estratégias de resolução do problema. Entretanto, o ponto chave de problemas de otimização multiobjetivo não é o resultado em si (dado que há n soluções possíveis para um mesmo problema) e sim a ordenação dos objetivos em ordem descrescente de prioridade e a avaliação do impacto da decisão de escolher uma determinada ordenação sobre o resultado da otimização. Portanto, pode-se concluir que a resolução de problemas de otimização multiobjetivo é um caso especial de processo de tomada de decisão.

Segundo a Teoria de Tomada de decisão, existem, basicamente, dois critérios antagônicos para tomada de decisão:

- max min Lucro: direciona o tomador de decisão a escolher a opção que gere o
  maior lucro na pior condição possível. Este critério prioriza a robustez da
  solução caso ocorra a pior condição, sendo, portanto, o extremo do
  conservadorismo e pessimismo;
- *min max Arrependimento:* direciona o tomador de decisão a escolher a opção que minimize o arrependimento caso ocorra a melhor condição. Este critério

prioriza a ousadia na expectiva de obter o lucro máximo, sendo o extremo da propensão ao risco de perda.

É possível gerar soluções como combinação destes dois critérios, avaliando os *trade offs* entre ser mais conservador ou ser mais ousado, conforme demonstração dos Teoremas do Apostador (BEN-HAIM, 2000). A partir dos teoremas mencionados, é possível tirar as seguintes conclusões (BEN-HAIM, 2000):

- A escolha de uma dada solução é muito influenciada pelo nível mínimo de recompensa (lucro) aceitável para o tomador de decisão.
- Quanto maior a recompensa crítica, menor a aversão ao risco.
- Quanto maior a incerteza, maior é a aversão ao risco.
- Uma maior incerteza pode ser compensada pela definição de uma maior recompensa crítica.

### CAPÍTULO 3

# INCERTEZAS DE PROJETO E INCERTEZAS PARAMÉTRICAS

Neste capítulo, será discutida detalhadamente a relação entre as incertezas de projeto e as incertezas paramétricas. Será mostrado como surgem as incertezas paramétricas e a participação delas como causa das incertezas de projeto. Da mesma forma, uma breve revisão bibliográfica será feita sobre os procedimentos adotados na literatura para tratar este problema. Em seguida, é apresentada a proposta de avaliação da relação entre incertezas paramétricas e as incertezas de projeto, empregada por este trabalho.

#### 3.1 ORIGEM DAS INCERTEZAS PARAMÉTRICAS.

Conforme discutido na Seção 1.2 do Capítulo 1, as incertezas paramétricas originam-se da propagação das incertezas de medição dos dados experimentais, quando o modelo é ajustado aos dados experimentais disponíveis, por meio de procedimentos de estimação de parâmetros. Adicionalmente, a potencial inadequação do modelo adotado para descrever o problema, resultante da necessidade de simplificação do modelo, pode contribuir também para que os parâmetros deste apresentem maior incerteza.

É importante reforçar que a qualidade dos parâmetros estimados de um modelo (sua precisão) é totalmente dependente da qualidade da informação obtida das medições experimentais. Qualquer erro de medição presente nas observações experimentais deteriora o conteúdo de informação e a qualidade dos parâmetros estimados (KIUREGHIAN e DITLEVSEN, 2009).

Normalmente, as incertezas paramétricas são de natureza epistêmica, porque tais incertezas podem ser reduzidas com o aumento da quantidade de medições experimentais disponibilizadas, bem como a busca de métodos de medição menos sujeitos à variabilidade experimental (KIUREGHIAN e DITLEVSEN, 2009). Por essa razão, sempre é desejável que se faça uma caracterização estatística apropriada dos erros de medição, a partir da repetição sistemática das medidas experimentais. Se possível, deve ser conduzida a identificação do modelo de distribuição de probabilidades mais adequada para representar o comportamento dos erros experimentais (SCHWAAB e PINTO, 2007).

# 3.2 DETERMINAÇÃO DAS INCERTEZAS PARAMÉTRICAS.

As incertezas paramétricas podem ser caracterizadas a partir da determinação da matriz de covariâncias paramétricas  $V_{\phi}$ , por meio da Equação (3.1), cuja a dedução é apresentada no Anexo D (SCHWAAB e PINTO, 2007):

$$\mathbf{V}_{0} = \mathbf{H}_{0}^{-1} [\mathbf{G}_{Y}, \mathbf{V}_{Y}, \mathbf{G}_{Y}^{T} + \mathbf{G}_{X}, \mathbf{V}_{X}, \mathbf{G}_{X}^{T}] \mathbf{H}_{0}^{-1}$$
(3.1)

sendo 
$$\mathbf{G}_{\mathbf{Y}} = \frac{\partial \left[ \nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left( \mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi} \right) \right]}{\partial \mathbf{y}^{e}}$$
 (3.2)

$$\mathbf{G}_{\mathbf{X}} = \frac{\partial \left[\nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj}(\mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi})\right]}{\partial \mathbf{x}^{e}}$$
(3.3)

$$\mathbf{H}_{\varphi} = \frac{\partial \left[\nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left(\mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi}\right)\right]}{\partial \varphi}$$
(3.4)

onde  $V_Y$  e  $V_X$  são as matrizes de covariâncias dos erros de medição das variáveis de saída e das variáveis de entrada, respectivamente.  $H_{\phi}$  é a matriz Hessiana de segundas derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros.  $G_Y$  e  $G_X$  são as matrizes de segundas derivadas da função objetivo em relação aos parâmetros e às variáveis de saída, e aos parâmetros e variáveis de entrada, respectivamente. A Equação (3.1) é válida para modelos em que as variáveis de entrada e as variáveis de saída possuem erros de medidas independentes entre si.

Nota-se na Equação (3.1) que a variância paramétrica é diretamente proporcional às variâncias dos erros de medição das variáveis de saída e das variáveis de entrada. Outra conclusão importante é que a variância paramétrica é fortemente influenciada pelo modelo adotado e a métrica utilizada para calcular os desvios entre os dados experimentais e aqueles preditos pelo referido modelo, uma vez que só é possível realizar os cálculos propostos pela Equação (3.1) após a definição da função objetivo.

# 3.3 COMO INCERTEZAS PARAMÉTRICAS CAUSAM INCERTEZAS DE PROJETO.

Na Seção 2.1 do Capítulo 2, foi discutida a constante preocupação dos engenheiros em antecipar as possíveis falhas de projeto em todas as suas etapas. As lacunas de conhecimento sobre algum assunto pertinente a um projeto podem gerar incertezas quanto ao sucesso deste no futuro. Em termos gerais, as incertezas de projeto compreendem as incertezas relacionadas com as decisões tomadas pelo engenheiro previamente à execução do projeto. Antes da execução, é impossível saber exatamente se as premissas básicas e simplificações adotadas, ou o modelo usado para representar o problema são adequados. O referencial de que os engenheiros se valem para antever complicações durante o projeto são o discernimento crítico e a experiência em projetos similares (PETROSKI, 1994).

Este trabalho dá especial atenção às incertezas de projeto referentes aos erros de predição de modelo, fortemente influenciados pelas incertezas paramétricas. A incerteza de projeto devida aos erros de predição pode ser representada pela matriz de covariâncias dos erros de predição do modelo  $\mathbf{V_Y}^{\mathrm{m}}$ , definida pela Equação (3.5), cuja a dedução completa é apresentada no Anexo E (SCHWAAB e PINTO, 2007):

$$\mathbf{V}_{\mathbf{Y}}^{\mathbf{m}} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{V}_{\boldsymbol{\xi}} \cdot \mathbf{B}^{\mathbf{T}} + \mathbf{V}_{\mathbf{Y}} \tag{3.5}$$

onde  $\xi = \{ \varphi, \mathbf{x}^m \}$  é o conjunto constituído pelos parâmetros do modelo  $\varphi$  e pelas variáveis de entrada reconciliadas  $\mathbf{x}^m$ ;  $\mathbf{V}_{\xi}$  é a matriz de covariâncias do conjunto  $\xi$  e  $\mathbf{B}$  é a matriz de sensibilidade, definida por (SCHWAAB e PINTO, 2007):

$$\mathbf{B} = \frac{\partial f(\mathbf{x}^m, \hat{\boldsymbol{\varphi}})}{\partial \mathcal{E}} \tag{3.6}$$

onde f é o modelo do processo.

A Equação (3.5) mostra que os erros de predição do modelo são diretamente proporcionais às variâncias paramétricas, que por sua vez, dependem dos erros de medição. Portanto, os erros de medição se propagam para a etapa de projeto, resultando em incertezas e riscos de operação. O modelo também exerce forte influência sobre as variâncias de predição, como pode ser observado pela definição da matriz **B**, mostrada na Equação (3.6).

## 3.4 INFLUÊNCIA DAS INCERTEZAS PARAMÉTRICAS NO PROJETO.

Muitas abordagens têm sido propostas para o problema de dimensionamento sob condições de incertezas na literatura. Todas estas abordagens apresentam como ponto comum o ato de superdimensionar o projeto, com o intuito de que ele seja capaz de operar eficientemente, mesmo quando ele se encontra sujeito às variações e incertezas de variáveis importantes (DOERING e GADDY, 1979; MORARI, 1983, PISTIKOPOULOS e GROSSMANN, 1988; BERNARDO *et al.*, 2003, BIEGLER e GROSSMANN, 2004).

As incertezas podem ser representadas na formulação do problema de otimização de duas maneiras (ACEVEDO e PISTIKOPOULOS, 1996, BERNARDO *et al.*, 2003, BIEGLER e GROSSMANN, 2004):

- "determinística": a incerteza é descrita pelos valores limites do desvio esperado (intervalo de confiança), apresentados como um conjunto de N cenários discretos ou períodos para o caso de incertezas que ocorrem ao longo do tempo.
   Normalmente, é utilizada para representar incertezas tais como a variabilidade sazonal de demanda de um determinado produto;
- estocástica: a incerteza é descrita como uma variável aleatória contínua que segue alguma função de densidade de probabilidade. Normalmente, é utilizada para representar a variabilidade de uma variável operacional na condição de estado estacionário.

As primeiras abordagens de dimensionamento por otimização eram determinísticas, ou seja, desconsideravam a existência de incertezas sobre o processo a ser otimizado. Vários pesquisadores buscaram adaptar técnicas de otimização determinísticas, tais como programação linear e a programação não-linear resolvida por técnicas de Monte Carlo, por meio da introdução de variáveis incertas "determinísticas" ou estocásticas (aleatórias segundo uma distribuição de probabilidade) ou pela avaliação de múltiplos cenários de valores possíveis para as variáveis incertas (MORARI, 1983; BIEGLER e GROSSMANN, 2004).

Desde a década de 1980, considerável esforço foi realizado por diversos pesquisadores em desenvolver métodos para avaliar e otimizar flexibilidade em problemas de dimensionamento de processos, os quais são normalmente não-lineares (BIEGLER e GROSSMANN, 2004). Neste tipo de métodos de otimização, é necessário quantificar qualidades, tais como a flexibilidade e a resiliência, cujas definições são apresentadas na Seção 2.4 do Capítulo 2. GROSSMANN e SARGENT (1979) sugeriram uma maneira simples de representar a flexibilidade de um processo, por intermédio do dimensionamento simultâneo de *N* diferentes cenários de operação. Por exemplo, uma planta poderia ser especificada para processar uma variedade de matérias-primas, produzir diferentes produtos ou operar a diferentes níveis de capacidade, por meio da otimização de *N* sucessivos períodos de otimização, utilizando programação não linear (GROSSMANN *et al.*, 1983, ACEVEDO e PISTIKOPOULOS, 1996).

Dentre as métricas utilizadas para medir flexibilidade, a dependabilidade, cujo conceito foi apresentado na Seção 2.4 do Capítulo 2, foi adotada por DOERING e GADDY (1981). A função objetivo consistia em calcular, para cada possível projeto, se este atendia a todas as restrições diante da simulação estocástica de variáveis consideradas com incerteza. Caso o critério de dependabilidade fosse atendido, o projeto era registrado como válido, sendo o projeto ótimo aquele que apresentasse o melhor resultado econômico (GROSSMANN *et al.*, 1983).

A formulação mais freqüentemente adotada pela literatura para tratar incertezas em problemas de otimização é composta por duas funções objetivos que são resolvidas simultaneamente. A primeira função objetivo refere-se à minimização de uma função custo, composta por uma parcela custo de capital e por outra parcela custo operacional relacionada com as variáveis de decisão. A segunda função refere-se à maximização de alguma função objetivo relacionada ao desempenho do processo, podendo ser utilizada

a métrica de flexibilidade, desempenho do processo em malha de controle fechada ou a avaliação de múltiplos cenários (GROSSMANN *et al.*, 1983, DAVID PAI e HUGHES, 1987; PISTIKOPOULOS e GROSSMANN, 1988; CHACON-MONTDRAGON e HIMMELBLAU, 1996; ACEVEDO e PISTIKOPOULOS, 1996; BIEGLER e GROSSMANN, 2004; RYU *et al.*, 2007).

Problemas de otimização com uma única função objetivo apresentam uma solução factível no domínio das variáveis de decisão dita como solução ótima quando esta representa o melhor valor para a função objetivo. A busca pela solução ótima para problemas de otimização multiobjetivo é mais complexa porque uma solução que maximiza alguma das funções objetivo não irá, necessariamente, maximizar qualquer outra função objetivo. Portanto, o conceito de solução ótima para problemas multiobjetivos é diferente daquele adotado para problemas com um objetivo único. Tradicionalmente, é empregado o conceito de curva de soluções de Pareto que consiste no conjunto de soluções factíveis não-inferiores. Soluções não-inferiores é o termo dado para soluções factíveis de problemas multiobjetivos para as quais não há nenhuma outra solução factível correspondente que gere uma melhora do valor de uma das funções objetivo sem que o valor de pelo menos alguma outra função objetivo seja prejudicada. Para avaliar soluções factíveis que não estejam contidas na curva de Pareto, é necessário o tomador de decisão opinar sobre o balanço de ganhos e perdas em priorizar um objetivo em detrimento dos outros objetivos. A atividade de estabelecimento de prioridades de objetivos e avaliação de ganhos e perdas é denominada de trade off (CHACON-MONTDRAGON e HIMMELBLAU, 1996; GUILLÉN et al., 2005).

De forma geral, as métricas de flexibilidade propostas na literatura envolvem determinar o desvio máximo que um projeto pode tolerar tal que qualquer ponto do hiperespaço das variáveis incertas é factível. A mensuração pelo índice de flexibilidade consiste na determinação do maior hiperretângulo que pode ser inscrito dentro da região paramétrica de operação factível. Outra métrica menos conservativa do que a primeira é a flexibilidade estocástica que corresponde qualitativamente à fração do hiperespaço das variáveis incertas contidas na região de operação factível (GROSSMANN *et al.* 1983; BERNARDO *et al.*, 2003; BIEGLER e GROSSMANN, 2004).

Um fator de grande influência advinda da definição do conceito de flexibilidade é a necessidade de delimitar claramente a região factível de operação dentro do hiperespaço de valores possíveis das variáveis incertas. Para contornar o esforço computacional intensivo para resolver o problema de otimização de se encontrar o

vértice factível do hiperretângulo, foi proposto um método alternativo no qual a região de operação factível projetado sobre o hiperespaço das variáveis de decisão e das variáveis incertas é expressa em termos de conjuntos de restrições ativas. Estes conjuntos de restrições ativas podem ser definidos como o somatório de subconjuntos de multiplicadores não-zero que satisfazem as condições de Kuhn-Tucker, Desta forma, o problema de otimização de busca do índice de flexibilidade pode ser reformulado como um problema de programação não-linear inteira mista (*PNLIM*) e caso as restrições forem todas lineares, o problema pode ser resolvido como uma programação linear inteira mista (*PLIM*) (GROSSMANN *et al.* 1983; BERNARDO *et al.*, 2003; BIEGLER e GROSSMANN, 2004):

As metodologias citadas acima possuem sérias limitações quando são empregadas para tratar de incertezas paramétricas (GROSSMANN *et al.* 1983; PINTO, 1998; PINTO, 2001):

- Metodologias foram formuladas para variáveis que apresentam incertezas independentes entre si, como por exemplo, os custos de matérias-primas, temperatura da corrente de entrada, o nível de demanda, entre outras. Nesses casos, a região factível pode ser facilmente definida como a região entre os limites mínimo e máximo de valores possíveis para cada variável incerta;
- Usualmente, as incertezas em parâmetros do mesmo modelo apresentam forte correlação entre si. Sempre é necessário delimitar rigorosamente a região paramétrica factível, antes da execução dos cálculos estocásticos de otimização. Esta delimitação torna-se muito penosa para problemas com n parâmetros sujeitos a incertezas, pois a região factível pode ter alguma forma complexa e está inserida no espaço n-dimensional;
- A definição do índice de flexibilidade é arbitrária. Quando a região paramétrica factível é muito irregular, pode haver o risco do hiperrentângulo inscrito subestimar ou superestimar o hipervolume da região paramétrica. Além disso, não há garantia alguma que o *trade off* entre parâmetros seja monotonicamente proporcional ao aumento da amplitude do hipervolume. Portanto, a escolha da escala e o valor nominal da variável incerta pode influenciar a resposta ótima encontrada para um dado problema;
- A formulação do problema de dimensionamento proposta por GROSSMANN
   em termos de PNLIM (programação não-linear inteira mista) funciona melhor

para problemas com poucas variáveis incertas. Para problemas mais complexos é necessário aplicar técnicas numéricas tais como decomposição de Benders, decomposião dual ou relaxação langrangeana que pemitam reduzir o esforço computacional dispensado na busca da solução ótima (GROSSMANN *et. al,* 2001; KARUPPIAH *et. al,* 2008; LIU *et. al,* 2010)

Diante destas constatações, PINTO (1998) propôs uma formulação bastante elegante para dimensionar projetos sujeitos a incertezas paramétricas. Esta formulação permite determinar o lucro mínimo esperado  $L_{99\%}$  com um determinado nível de confiança, considerando por hipótese que a distribuição de probabilidades do lucro possa ser descrita por uma curva gaussiana, dada por (PINTO, 1998; PINTO, 2001):

$$L_{99\%} = L + \overline{\Delta L} - 2,35 \,\sigma_{\Lambda L} \tag{3.7}$$

sendo 
$$\sigma_{M}^{2} = \overline{\Delta L}^{2} - (\overline{\Delta L})^{2}$$
 (3.8)

$$\overline{\Delta L} = \sum_{i=1}^{NZ} \sum_{j=1}^{NZ} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial z_i \partial z_j} \sigma_{zij}^2 + \sum_{i=1}^{NW} \sum_{j=1}^{NW} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial w_i \partial w_j} \sigma_{wij}^2 + \sum_{i=1}^{N\alpha} \sum_{j=1}^{N\alpha} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} \sigma_{\alpha ij}^2$$
(3.9)

$$\overline{\Delta L}^{2} = \sum_{i=1}^{NZ} \sum_{j=1}^{NZ} \frac{\partial L}{\partial z_{i}} \frac{\partial L}{\partial z_{j}} \sigma_{zij}^{2} + \sum_{i=1}^{NW} \sum_{j=1}^{NW} \frac{\partial L}{\partial w_{i}} \frac{\partial L}{\partial w_{j}} \sigma_{wij}^{2} + \sum_{i=1}^{N\alpha} \sum_{j=1}^{N\alpha} \frac{\partial L}{\partial \alpha_{i}} \frac{\partial L}{\partial \alpha_{j}} \sigma_{aij}^{2}$$
(3.10)

onde  $\overline{\Delta L}$  é o desvio médio do lucro,  $\sigma_{\Delta L}$  é a variância do desvio médio do lucro,  $\overline{\Delta L}^2$  é a variância do desvio do lucro, z, w e  $\alpha$  são vetores de variáveis de decisão (que são manipuladas durante otimização), variáveis fixas e parâmetros do modelo, respectivamente.

Esta metodologia permite estimar as perdas totais médias esperadas por não operar um processo numa condição ótima desconhecida devido às incertezas paramétricas, denominado por ele como *custo da incerteza paramétrica* (PINTO, 1998). PINTO (1998) provou que o custo da incerteza paramétrica é sempre positivo, o que significa que as incertezas sempre provocam um efeito prejudicial sobre a operação de um processo.

A grande contribuição de PINTO (1998; 2001) foi estabelecer uma forte relação entre o procedimento de dimensionamento de projeto e os fundamentos estatísticos da rotina de estimação de parâmetros. Esta relação havia sido negligenciada pelos pesquisadores anteriores.

Baseado nesta fundamentação, PINTO (2001) estudou o emprego da estratégia EVOP (*Evolucionary Operation Procedure*) quando as perturbações do processo mostram-se benéficas, elas são conservadas e o lucro acumulado do período tende a ser aumentado. Adicionalmente, PINTO (2001) utilizou a técnica de *planejamento sequencial de experimentos* com o intuito de indicar o ponto experimental adicional que minimize a incerteza paramétrica e demonstrar a relação com custo da realização deste experimento. A idéia básica da técnica de *planejamento sequencial de experimentos* foi originalmente proposta por BOX e LUCAS (1959) para indicar os pontos experimentais que poderiam minimizar o volume do hiperelipsóide da matriz de covariâncias posteriores dos parâmetros, segundo a formulação de BARD (1974) (PINTO *et. al*, 1991; PINTO, 2001; ISSANCHOU *et. al*, 2005; THOMPSON *et. al*, 2010)

O grupo de pesquisa de GROSSMANN tem mostrado bastante interesse nos últimos anos em aplicar a formulação do problema de otimização como *PNLIM* e *PLIM* para problemas de planejamento de seqüenciamento de operações (*scheduling*) e de cadeias de suprimento em ambiente de incertezas (IERAPETRITOU *et al.*, 1994; GROSSMANN *et. al,* 2001; RYU *et al.*, 2007; KARUPPIAH e GROSSMANN, 2008, YOU e GROSSMANN, 2008), bem como síntese de processos em série (TARHAN e GROSSMANN, 2008), como por exemplo sistemas de poligeração de energia a partir de combustíveis fósseis sob condições de incerteza (LIU *et. al*, 2010).

Uma importante vertente de trabalhos compreende a integração dos procedimentos de dimensionamento, projeto de controles de projeto e operabilidade, onde a otimização ocorre simultaneamente para dimensionamento e controle de processos, visando ao desenvolvimento de processos mais flexíveis, estáveis e controláveis. Para simular comportamento dinâmico do processo em condições de perturbações torna-se necessário o emprego de modelos constituídos por equações algébrico-diferenciais. A base dos métodos de solução consiste em discretizar as equações diferenciais e resolvê-las em conjunto com as equações algébricas não-lineares da formulação usual do problema de *PNLIM* que representam a etapa de dimensionamento e seqüenciamento de operações (*scheduling*). Os principais desafios presentes para este ramo de estudo sobre operabilidade de processos são a necessidade

de métodos de solução mais rigorosos e eficientes para problemas de otimização dinâmica e a incorporação de modelos de controladores avançados (SAKIZLIS *et al.*, 2004; RICARDEZ SANDOVAL *et al.*, 2008; TERRAZAS-MORENO *et. al*, 2008)

Outra vertente de trabalhos recentes envolve problemas de otimização em tempo real, RTO (Real Time Optimization), que compreendem a otimização de processos já dimensionados sujeitos às incertezas de mercado, de processo, de medição e paramétricas. Esta metodologia emprega uma rotina de amostragem periódica de dados das variáveis de processo que alimentam modelos de controle preditivo. Quando o modelo verifica que ocorre um desvio significativo dos dados medidos, ele efetua um procedimento de re-estimação de parâmetros com reconciliação de dados. O modelo do processo é atualizado com os novos parâmetros re-estimados e o controlador é novamente sintonizado. Desta forma, espera-se que o processo aproxime-se mais da condição ótima de operação para as condições verificadas dentro da janela de amostragem de dados. A estratégia RTO permite contornar o impacto de incertezas em geral sobre o desempenho do processo de uma maneira indireta, desde que estas incertezas não sejam severas ou causem um grande impacto. Todavia, como as propostas anteriores, o RTO dispensa muita pouca atenção sobre a significância das incertezas paramétricas e das regiões de confiança correspondentes (CUTLER e PERRY, 1983; KIEHL e von STRYK, 1992; ZHANG et al., 2002; SOUZA et al., 2010; KÜHL et al., 2011).

#### 3.5 METODOLOGIA PROPOSTA.

Com o intuito de avaliar e quantificar os efeitos das incertezas durante o dimensionamento de projetos, o presente trabalho combina uma abordagem estatística com o cálculo de dimensionamento exaustivo para todas as condições prováveis, dado um determinado nível de confiança. A ideia fundamental deste trabalho consiste em percorrer todas as etapas características de problemas de projeto, incluindo a concepção dos objetivos, a modelagem e o dimensionamento, para mostrar como os erros experimentais se propagam por todas as fases do projeto e como é possível quantificar o valor do erro experimental e sua influência sobre os resultados obtidos. As etapas de projeto podem ser divididas em três grandes grupos: a fase experimental e modelagem; a fase de projeto e a fase de operação.

A fase experimental compreende as seguintes etapas:

- Planejamento experimental e discriminação das variáveis relevantes de entrada e
  de saída. Nesta etapa, é estabelecida a faixa de interesse no espaço amostral,
  para que se obtenham dados experimentais adequados para a estimação de
  parâmetros e identificação do modelo;
- Geração de dados experimentais, para identificação do processo. No presente trabalho, os dados experimentais serão gerados a partir de um modelo tido como o verdadeiro (não necessariamente o mesmo da etapa de estimação de parâmetros) e corrompidos com ruído aleatório, de acordo com uma dada distribuição de probabilidade P(x). O objetivo fundamental é o de caracterizar a importância do ruído sobre os resultados. Serão avaliados os efeitos do tipo de distribuição da amplitude do erro experimental sobre o projeto final. Os dados pseudoexperimentais obtidos serão usados como dados de entrada para a etapa de Estimação de Parâmetros;
- Estimação de parâmetros para quantificação dos efeitos das variáveis de processo. No presente trabalho, a etapa de estimação de parâmetros foi realizada com o auxilio de um algoritmo de otimização de enxame de partículas proposto por SCHWAAB et al. (2008a). Foram considerados tanto casos de estimação simples, em que é considerado apenas o erro nas variáveis de saída, quanto casos de reconciliação de dados, em que os erros de todas as variáveis são considerados simultaneamente. Também foi avaliada a influência que o uso de um modelo equivocado pode exercer sobre o sistema;
- Delimitação da região de confiança a um dado grau de confiança (1 α) para os parâmetros do modelo, para quantificar a incerteza paramétrica existente. A determinação da região de confiança foi realizada conforme proposto por SCHWAAB *et al.* (2008a). Os valores contidos na região de confiança paramétrica são registrados e usados nas etapas posteriores.

Na fase de projeto, é feito o dimensionamento das condições nominais, que maximizam a função lucro pré-estabelecida. No presente trabalho, foram gerados projetos a partir de *n* conjuntos de valores prováveis para a região de confiança dos parâmetros do modelo. Para cada projeto nominal dimensionado em particular, foram calculados os lucros para as *n* condições prováveis dos parâmetros. O resultado desse

procedimento é um hipervolume de lucros esperados, construído a partir de cada projeto. Dentre os projetos contidos no hipervolume, deve ser estabelecido um critério de escolha para apontar qual projeto proporciona o maior retorno financeiro com um nível de risco tolerado e previamente decidido.

Na fase de operação, deve ser avaliada a sensibilidade na faixa de operação do processo, avaliando-se a influência da variação de preços, vazões e concentrações sobre o retorno do investimento. Deve-se também estabelecer um ponto de equilíbrio operacional, para garantir um dado lucro mínimo para manter a operação.

# 3.6 PROCEDIMENTO DE ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E GERAÇÃO DE REGIÃO DE CONFIANÇA PARAMÉTRICA.

Obtidos os dados pseudoexperimentais, segue-se a etapa de estimação de parâmetros. O objetivo desta etapa é buscar os valores dos parâmetros que minimizam uma métrica dos desvios existente entre os dados pseudoexperimentais e o modelo ajustado (SCHWAAB e PINTO, 2007). Dentre os vários métodos numéricos usados para a minimização da função objetivo, podem ser citados os métodos baseados no cálculo das derivadas da função objetivo e aqueles baseados na busca direta da função objetivo, empregando métodos heurísticos para nortear a busca (SCHWAAB e PINTO, 2007). O presente trabalho empregou, para fins de minimização da função objetivo o Método de Otimização por Enxame de Partículas, *Particle Swarm Optimization*, como foi descrito por SCHWAAB *et al.* (2008a). SCHWAAB *et al.* (2008a) sugerem que o resultado obtido pelo Método do Enxame de Partículas (MEP) seja refinado ao final do processo de estimação com o auxilio de um Método de Newton com controle de passo, conforme proposto por SCHWAAB e PINTO (2007). O algoritmo aqui utilizado é descrito detalhadamente no Apêndice I. Todos os algoritmos do presente trabalho foram implementados em FORTRAN 90.

Durante a execução do procedimento do MEP, inúmeros pontos do hiperespaço de valores de parâmetros possíveis são visitados e a função objetivo  $F_{obj}(\varphi)$  é calculada para os respectivos parâmetros. No presente trabalho, a função objetivo utilizada tinha a forma mostrada pela Equação (3.11) (SCHWAAB *et al.*, 2008a).

$$F_{obj}(\varphi) = (\mathbf{Z}^{e} - \mathbf{Z}^{m})^{T} \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{Z}^{e} - \mathbf{Z}^{m})$$
(3.11)

onde  $F_{obj}(\varphi)$  é a função objetivo correspondente à função de verossimilhança, quando admite que os desvios experimentais seguem a distribuição normal, considerando ainda as hipóteses de que o modelo é perfeito e de que os experimentos são bem feitos.  $\mathbf{Z}$  é o vetor que contém as variáveis de entrada e as variáveis de saída, calculadas pelo modelo, enquanto que  $\mathbf{Z}^{\mathbf{e}}$  é o vetor que contém as medições experimentais das variáveis de entrada e as de saída.  $\mathbf{V}$  é a matriz de covariâncias das medidas experimentais e  $\varphi$  é o vetor de parâmetros do modelo.

Todos os valores considerados para os parâmetros e as respectivas funções objetivos são registrados em um arquivo de saída de dados, para posterior execução da etapa de delimitação da região de confiança dos parâmetros. A vantagem de conciliar o esforço computacional de um procedimento de busca direta para determinar o ponto mínimo da função objetivo com a geração da região de confiança dos parâmetros foi discutida por SCHWAAB *et al.* (2008a). A abordagem tradicional para delimitação da região de confiança baseia-se em uma aproximação de segunda ordem da função objetivo. Considere a expansão em série de Taylor da função objetivo em torno do ponto mínimo, truncada no segundo termo (SCHWAAB *et al.*, 2008a):

$$F_{obj}(\varphi) = F_{obj}(\hat{\varphi}) + (\varphi - \hat{\varphi})^T \nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} + \frac{1}{2} (\varphi - \hat{\varphi})^T \mathbf{H}_{\hat{\varphi}} (\varphi - \hat{\varphi})$$
(3.12)

onde ^ denota uma estimativa do ponto mínimo,  $\nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} = \mathbf{0}$  é o vetor gradiente e  $\mathbf{H}_{\hat{\varphi}}$  é a matriz Hessiana de derivadas segundas da função objetivo. Caso a Equação (3.11) seja usada para descrever a função objetivo, pode-se definir a matriz Hessiana como (SCHWAAB *et al.*, 2008a):

$$\mathbf{H}_{\hat{\varphi}} = 2 \left( \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \varphi} \right)^{T} \mathbf{V}_{z}^{-1} \left( \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \varphi} \right)$$
(3.13)

Sabe-se também que a matriz Hessiana mantém a seguinte relação com a matriz de correlação paramétrica (SCHWAAB *et al.*, 2008a):

$$\mathbf{H}_{\hat{\varphi}} = 2\mathbf{V}_{\varphi}^{-1} \tag{3.14}$$

A Equação (3.12) pode então ser reescrita como (SCHWAAB et al., 2008a):

$$F_{obj}(\varphi) - F_{obj}(\hat{\varphi}) = (\varphi - \hat{\varphi})^T \mathbf{V}_{\varphi}^{-1} (\varphi - \hat{\varphi}) \equiv \chi_{p}^{2}$$
(3.15)

onde  $\chi_p^2$  é a função qui quadrado com p=NP (número total de parâmetros) graus de liberdade. Como a função objetivo da Equação (3.11) pode ser considerada uma variável aleatória que segue a distribuição qui quadrado com n-p graus de liberdade, sendo n o número total de pontos experimentais, a seguinte expressão pode ser escrita (SCHWAAB  $et\ al.$ , 2008a):

$$\frac{\left[F_{obj}(\varphi) - F_{obj}(\hat{\varphi})\right]/p}{F_{obj}(\hat{\varphi})/(n-p)} = \frac{\left[(\varphi - \hat{\varphi})^T \mathbf{V}_{\varphi}^{-1}(\varphi - \hat{\varphi})\right]/p}{F_{obj}(\hat{\varphi})/(n-p)} \equiv F_{p,n-p}$$
(3.16)

onde  $F_{p,n-p}$  é a função F de Fisher com graus de liberdade (p; n-p). Para um nível de confiança  $(1-\alpha)$ , a região de confiança apresentada no lado direito da Equação (3.16) pode ser expressa como (SCHWAAB *et al.*, 2008a):

$$\left(\varphi - \hat{\varphi}\right)^{T} \mathbf{V}_{\varphi}^{-1} \left(\varphi - \hat{\varphi}\right) \leq \frac{p}{(n-p)} F_{obj} \left(\hat{\varphi}\right) F_{p,n-p}^{1-\alpha}$$
(3.17)

A Equação (3.17) define um hiperelipsóide no espaço paramétrico, correspondente à aproximação normal da região de confiança. O intervalo de confiança dos parâmetros do modelo pode ser definido como (SCHWAAB *et al.*, 2008a):

$$\varphi_{i} \pm t_{n-p}^{1-\alpha/2} \left( s^{2} v_{ii} \right)^{1/2} \tag{3.18}$$

onde  $v_{ii}$  é o *i*-ésimo elemento da diagonal da matriz  $\mathbf{V}_{\varphi}$  e  $s^2$ , sendo definido como:

$$s^2 = \frac{F_{obj}(\hat{\varphi})}{(n-p)}; \tag{3.19}$$

 $t_{n-p}^{1-\alpha/2}$  é a função t-Student com n-p graus de liberdade e nível de confiança  $(1-\alpha/2)$ .

A suposição de uma região de confiança hiperelipsoidal nem sempre é verdadeira, mesmo para casos em que os erros de medida seguem a distribuição normal, devido à não linearidade do modelo e à amplitude da variabilidade das medidas. O uso da aproximação normal da Equação (3.17) sempre resulta na definição de um hiperelipsóide fechado, independentemente do modelo adotado (linear ou não-linear) e da variância das medidas (SCHWAAB *et al.*, 2008a).

SCHWAAB *et al.* (2008a) propuseram a Equação (3.20) para determinar a região de confiança paramétrica que é solução exata para modelos lineares e é, em geral, uma boa aproximação para problemas não-lineares. Uma grande vantagem da Equação (3.20) em relação à Equação (3.17) é que o formato da região de confiança paramétrica não é forçada a se distorcer para um hiperelipsóide característico de regiões de confiança normal, apesar de que a Equação (3.20) foi derivada da identidade do lado esquerdo da Equação (3.16), baseada originalmente na hipótese de normalidade.

O procedimento de delimitação da região de confiança paramétrica está baseado na execução de duas etapas seqüenciais (SCHWAAB *et al.*, 2008a):

- Executar a rotina de MEP, varrendo o hiperespaço da região de confiança paramétrica para encontrar o vetor de parâmetros ótimos  $\hat{\varphi}$  e registrando todos os vetores  $\varphi$  e respectivos  $F_{obj}(\varphi)$  não-ótimos testados durante a minimização da função objetivo;
- Dado o nível de confiança (1–  $\alpha$ ), testar para cada conjunto  $\{\varphi, F_{obj}(\varphi)\}$  o critério definido pela Equação (3.20). Se tal critério é satisfeito,  $\{\varphi, F_{obj}(\varphi)\}$  está contido na região de confiança e é registrado em um arquivo de saída de dados; caso contrário, o conjunto é descartado.

$$F_{obj}(\varphi) \le F_{obj}(\hat{\varphi}) \cdot \left(1 + \frac{p}{n-p} F_{p,n-p}^{1-\alpha}\right)$$
(3.20)

onde  $F_{p,n-p}^{1-\alpha}$  é a função F de Fisher a um nível de confiança— $(1 \quad \alpha)$  com graus de liberdade (p; n-p);  $\hat{\varphi}$  é o vetor de parâmetros ótimos do modelo; p é o número total de parâmetros estimados e n é o número total de pontos experimentais disponíveis.

# 3.7 PROCEDIMENTO PARA DETERMINAÇÃO DO PROJETO DE ROBUSTEZ MÁXIMA.

Dentre todos os projetos possíveis para uma região de confiança paramétrica, o projetista está interessado na configuração que esteja menos sujeita a um desempenho desfavorável, caso as condições de projeto não se confirmem; ou seja, que o projeto seja robusto. Uma abordagem para determinar a configuração de projeto que apresenta robustez máxima consiste no cálculo intensivo dos projetos ótimos para todas as coordenadas dentro da região de confiança paramétrica, selecionando aquela condição que proporcionar o menor lucro ótimo (estratégia *minimax*). Esta abordagem é a mais conservadora e visa a garantir um ganho mínimo para o empreendimento, como discutido no Capítulo 2. Dessa forma, os efeitos resultantes das incertezas serão sempre benéficos, caracterizando a referida abordagem como uma estratégia de risco zero. Salienta-se que essa abordagem foi utilizada no problema do Capítulo 4.

Uma abordagem alternativa para busca do projeto que apresenta a robustez máxima é proposta no presente trabalho. A estratégia consiste em restringir as buscas para as condições paramétricas situadas na fronteira da região de confiança. Na maioria dos problemas, a condição *minimax* está localizada justamente na fronteira, pois o ponto ótimo depende monotonicamente do valor dos parâmetros numa região suficientemente próxima do ponto nominal, como mostrado no Anexo F. Para garantir que não haja nenhuma outra coordenada de parâmetros no interior da região de confiança paramétrica que apresente lucro ótimo menor do que o mínimo da fronteira da mesma, o algoritmo de busca foi executado, conforme descrito no Apêndice II.

# 3.8 PROCEDIMENTO DE CÁLCULO DE *TRADE OFF* ENTRE ROBUSTEZ E OPORTUNIDADE.

No Capítulo 2, foi mostrado que é possível adotar consistentemente grandezas para mensurar risco por meio da robustez e de oportunidade, relacionando-as com o conceito de recompensa ou lucro mínimo esperado pelo tomador de decisão. Foi mostrado também que o nível de recompensa mínima adotado exerce forte influência sobre a decisão que será tomada.

O presente trabalho pretende determinar as melhores configurações de projeto, segundo os critérios de robustez máxima e oportunidade máxima, para valores crescentes de recompensa crítica. Da mesma forma, pode ser calculada a grandeza oportunidade para um nível de recompensa dos sonhos constante. Estabelecida a curva que relaciona a perda de robustez, o ganho de recompensa e o aumento de oportunidade, o tomador de decisão pode ter as informações necessárias para avaliar o *trade off* entre essas grandezas; ou seja, o tomador de decisão pode estabelecer uma taxa de câmbio aceitável para aceitar arriscar-se mais diante da possibilidade de ter um lucro maior. Por essa razão, é proposto, neste trabalho, um algoritmo que permite quantificar as grandezas robustez e oportunidade, verificando o comportamento delas em relação à recompensa crítica e à recompensa dos sonhos. O referido algoritmo é apresentado no Apêndice III.

O algoritmo para determinação de trade off entre robustez, oportunidade e níveis de recompensa baseia-se na formulação das métricas de robustez e oportunidade propostas por BEN-HAIM (2000), apresentadas no Capítulo 2. O algoritmo busca discretizar a região de confiança paramétrica em estreitos hiperretângulos, definindo, desta forma, as coordenadas dos limites da fronteira dessa região. Considerando válida a hipótese de que a função objetivo lucro do processo aumenta monotonicamente em função dos valores de parâmetros no sentido das fronteiras para os valores nominais, localizados no centro da região de confiança paramétrica, pode-se afirmar que os resultados mínimos e máximos de um determinado dimensionamento de projeto são obtidos para casos em que os valores de parâmetros adotados são os que estão localizados na fronteira da região de confiança paramétrica. Portanto, torna-se desnecessário calcular a função objetivo lucro para coordenadas paramétricas contidas no interior da região de confiança paramétrica. A Figura 3-1 ilustra o procedimento de discretização dos limites de fronteira da região paramétrica adotado para o problema de dimensionamento de um reator CSTR, apresentado no Capítulo 4. De acordo com a Figura 3-1, para cada nível do parâmetro  $k_2$  podem ser definidos dois valores extremos de  $k_I$ , de maneira que o procedimento identifica 2N valores na fronteira, onde N é o número de níveis adotados na discretização. No problema *n*-dimensional, identificam-se  $2N^{(n-1)}$  pontos na fronteira com a aplicação da técnica.

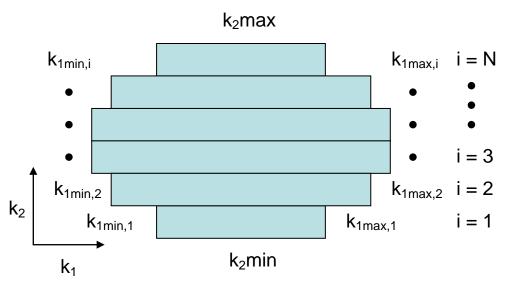


Figura 3-1: Desenho esquemático sobre o procedimento de discretização dos limites da fronteira de uma dada região de confiança paramétrica.

A quantificação da robustez e da oportunidade é feita por meio de um laço que calcula o lucro para as extremidades de um hiperretângulo e compara estes resultados com a recompensa crítica previamente adotada. Se a condição não é satisfeita, o laço prossegue para uma nova faixa de limites da região. A robustez α é definida como:

$$\alpha = \max \left\{ \frac{abs(k_j - k_{j,\text{nominal}})}{\Delta k_j \max} \right\}$$
 (3.21)

onde j é o índice do número de parâmetros que apresentam incerteza. Uma descrição dos passos da rotina de cálculo da robustez é apresentada abaixo:

### 1. Entrar com dados:

Conjunto de coordenadas de pontos de fronteira da região paramétrica com N classes, contendo  $\{k_1(i=1,...,N); k_2min(i=1,...,N); k_2max(i=1,...,N)\};$ 

 $R_c$  é a recompensa crítica;

Npasso é o número de passos para a busca pela robustez

Inc = 1,0/Npasso;

$$\Delta k_j \max = \max[(k_{j,1} - k_{j,\text{nominal}}); (k_{j,N} - k_{j,\text{nominal}})];$$

2. Para m = 1, ..., Npasso + 1, faça:

$$\alpha = 1.0 - (m - 1).Inc$$

$$k_j min0 = k_{j,nominal} - \alpha \cdot \Delta k_j max$$

$$k_i max0 = k_{i,nominal} + \alpha \cdot \Delta k_i Max$$

São encontrados oito pontos na fronteira da região paramétrica, conforme mostrado na Figura 3-2.

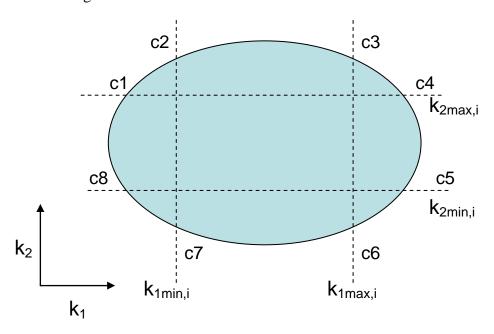


Figura 3-2: Desenho esquemático demonstrando as coordenadas de parâmetros utilizados para calcular a função objetivo lucro.

Calcula-se a função objetivo lucro para cada uma das oito condições de parâmetros que são registrados e escolhe-se o menor deles;

$$L_{min} = min\{L(c_1), L(c_2), ..., L(c_7), L(c_8)\}$$

Se  $(L_{min} \ge R_c)$ , então:

α é o valor da robustez

Sair do laço Para

Retorna para 2

A rotina de cálculo da medida de oportunidade é similar à usada para o cálculo de robustez, exceto porque é feita a maximização de L na forma:

Para 
$$m = 1, ..., Npasso + 1$$
, faça:

$$\beta = 0 + (m - 1).Inc$$

 $k_i min0 = k_{i,nominal} - \beta \cdot \Delta k_i max$ 

 $k_i max0 = k_{i,nominal} + \beta \cdot \Delta k_i max$ 

$$L_{max} = max\{L(c_1), L(c_2), ..., L(c_7), L(c_8)\}$$

Se  $(L_{max} \ge R_w)$ , então:

β é o valor da medida de oportunidade

Desta forma, os valores de  $\alpha$  e  $\beta$  podem ser calculados em função do nível de recompensa crítica e os cálculos de *trade off* podem ser realizados, como será apresentado no Capítulo 4. Vale a pena ressaltar que este procedimento é válido para modelos que sejam lineares em relação aos parâmetros, o que permite que seja utilizado o mesmo passo incremental tanto para os parâmetros  $k_1$  e  $k_2$ . Para modelos com parâmetros não-lineares, não seria possível adotar o mesmo valor para a função robustez  $\alpha$  para o conjunto de parâmetros.

# 3.9 PROCEDIMENTO PARA DETERMINAÇÃO DOS PONTOS DE EQUILÍBRO PARA OPERAÇÃO DO PROJETO.

Para avaliar o impacto de variações dos preços de venda de produto final e do custo das matérias-primas posteriormente à definição do projeto, podem ser calculados os preços mínimos de venda e a margem bruta mínima necessários para remunerar a operação do empreendimento em toda faixa, de forma que, ao final do período de vida projeto, o lucro líquido seja zero. Esses valores podem ser considerados como as fronteiras de preços que viabilizam a operação do projeto.

#### 3.10 COMENTÁRIOS FINAIS.

Neste capítulo foram discutidos como as incertezas paramétricas se originam e como elas podem influenciar o dimensionamento de projetos. Além disso, são apresentadas as metodologias existentes na literatura utilizadas para dimensionamento de projetos sujeitos a incertezas. Saliente-se que estes trabalhos ignoram a influência de incertezas paramétrica sobre as incertezas de projeto, ou trata do assunto de maneira muito incipiente.

Os procedimentos de delimitação da região de confiança paramétrica proposto por SCHWAAB *et al.* (2008a) e de escolha do melhor projeto, apresentados neste capítulo, são aplicados em dois problemas, como será apresentado nos Capítulos 4 e 5.

### CAPÍTULO 4

## ESTUDO DE CASO 1 PROJETO DE UM REATOR CSTR

O primeiro estudo de caso avaliado com a metodologia proposta é o de dimensionamento de um reator CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactor*) em fase líquida para duas reações em série, como proposto originalmente por PINTO (1998). A reação ocorre conforme apresentado abaixo:

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C \tag{4.1}$$

onde B é o produto desejado. Valores dos dados cinéticos e dos dados econômicos do problema são apresentados na Tabela 4.1 (PINTO, 1998).

Tabela 4.1: Dados disponíveis de preços de matérias-primas, de produtos, de sub-produto e outros custos (PINTO, 1998).

Variável	Valor	Descrição
US\$A	4,0 US\$/kg	Preço de custo do reagente A
US\$B	20,0 US\$/kg	Preço de venda do produto desejado
US\$C	3,0 US\$/kg	Preço do sub-produto
US\$ Q	$0,50 \text{ US}/\text{m}^3$	Custo operacional
US\$V	$20x10^6 \text{ US}/(\text{m}^3)^2$	Custo de Investimento
$C_{A0}$	$1000 \text{ kg/m}^3$	Concentração inicial da carga fresca
$k_{I}$	$2.5 \text{ h}^{-1}$	Constante cinética da reação 1
$k_2$	$1.0  h^{-1}$	Constante cinética da reação 2
$\Delta t$	2 anos	Tempo de vida do projeto

O problema de otimização consiste em encontrar o volume do reator ótimo e o tempo de residência ótimo, de tal forma a maximizar o lucro da operação em um período de dois anos, que é considerado como o tempo de vida do investimento. O modelo cinético de primeira ordem (CPO) é descrito por (PINTO, 1998):

$$C_A = \frac{C_{A0}}{\left(1 + k_1 \Theta\right)} \tag{4.2}$$

$$C_{B} = \frac{k_{1}\Theta C_{A0}}{(1+k_{1}\Theta)(1+k_{2}\Theta)} \tag{4.3}$$

$$C_C = \frac{k_1 k_2 \Theta^2 C_{A0}}{(1 + k_1 \Theta)(1 + k_2 \Theta)} \tag{4.4}$$

onde  $C_A$  é a concentração de reagente A a jusante do reator CSTR [kg/m³],  $C_B$  é a concentração do produto desejado B a jusante do reator CSTR [kg/m³],  $C_C$  é a concentração do sub-produto C a jusante do reator CSTR [kg/m³],  $\Theta$  é o tempo de residência no reator [h],  $k_1$  é a constante cinética de primeira ordem da reação 1 [h⁻¹] e  $k_2$  é a constante cinética de primeira ordem da reação 2 [h⁻¹]. A função lucro foi definida como (PINTO, 1998):

$$L(V,\Theta;k_1,k_2) = \frac{\left(C_B US\$B + C_c US\$C - C_{A0} US\$A - US\$Q\right)V \cdot \Delta t}{\Theta} - US\$V \cdot V^2$$
(4.5)

onde L é o lucro bruto [US\$] e V é o volume do reator [m<sup>3</sup>]

A Figura 4-1 mostra um desenho esquemático do reator CSTR usado ao longo de todo o Capítulo 4.

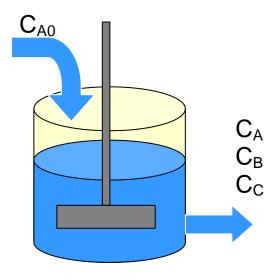


Figura 4-1: Esquema do reator CSTR.

O objetivo fundamental desse capítulo é avaliar, num sistema bastante simples, os efeitos que várias incertezas distintas podem exercer sobre o projeto final, estendendo a análise original proposto por PINTO (1998), que admitiu que as incertezas paramétricas podiam ser devidamente caracterizadas e esta informação era um dos dados do problema. No presente trabalho, os dados são gerados de distintas maneiras e usados para estimar os parâmetros cinéticos e incertezas experimentais. Dessa forma, é possível estabelecer uma conexão direta entre o problema de planejamento experimental com o problema de projeto do reator industrial.

#### 4.1 PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL

Conforme apresentado na seção anterior, o modelo possui duas variáveis de entrada (a concentração inicial do reagente A,  $C_{A0}$ , e o tempo de residência,  $\Theta$ ) e três variáveis de saída (concentrações a jusante do reator do reagente A,  $C_A$ , de produto B,  $C_B$ , e do sub-produto C,  $C_C$ ). Na Tabela 4.1, vê-se que a variável de entrada  $C_{A0}$  foi previamente definida como sendo igual a 1.000 kg/m³. Por isso, nesse trabalho, foi arbitrada uma faixa experimental em torno desta concentração, como mostrado na Tabela 4.2. Foram estipulados níveis mínimo e máximo para cada uma das variáveis de entrada para um planejamento fatorial, conforme mostrado nas Tabela 4.2 e 4.3. Foi inserido também o ponto central. O plano fatorial é constituído por cinco condições experimentais, sendo quatro combinações nos extremos da faixa e um experimento no ponto central com três réplicas (o que representa um total de sete pontos experimentais). A Tabela 4.3 mostra os valores das variáveis de saída para o modelo verdadeiro, calculado com os parâmetros da Tabela 4.1.

Tabela 4.2: Faixa experimental estipulada no planejamento fatorial do Estudo de Caso 1.

Nível	Variável de En	trada
Normalizado	$C_{A0} [kg/m^3]$	$\Theta$ [h]
-1	800	0,10
0	1000	1,00
+1	1200	1,90

Tabela 4.3: Plano fatorial para o Estudo de Caso 1, com as concentrações de saída esperadas para o
modelo verdadeiro, antes da etapa de corrupção dos dados com erros aleatórios.

modelo verdadeno, antes da etapa de corrupção dos dados com erros arcatorios.						
E	Variável de Entrada		V	Variável de Saída		
Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ [h]	$C_A [\text{kg/m}^3]$	$C_B [\text{kg/m}^3]$	$C_C$ [kg/m <sup>3</sup> ]	
1	+1	+1	208,7	341,8	649,5	
2	-1	+1	139,1	227,9	433,0	
3	+1	-1	960,0	218,2	21,8	
4	-1	-1	640,0	145,5	14,5	
5	0	0	285,7	357,1	357,1	
6	0	0	285,7	357,1	357,1	
7	0	0	285,7	357,1	357,1	

### 4.2 GERAÇÃO DOS DADOS PSEUDOEXPERIMENTAIS

Os dados pseudoexperimentais foram gerados por simulação, empregando um algoritmo em FORTRAN 90, no qual eram calculadas as variáveis de saída (concentrações de saída) do modelo, constituídos pelas Equações 4.2-4, para as cinco condições experimentais definidas na Tabela 4.3. Foram adotadas como verdadeiras as constantes cinéticas de primeira ordem listadas na Tabela 4.1 ( $k_I = 2,5 \text{ h}^{-1} \text{ e } k_2 = 1,0 \text{ h}^{-1}$ ).

Para simular o erro experimental e a presença de flutuações aleatórias nas variáveis de entrada e de saída, o algoritmo empregou sub-rotinas padrões do FORTRAN para geração de números aleatórios. Foram adotados dois vetores de desvios padrão: A e B. Todos os valores do vetor B eram cinco vezes maiores do que os do vetor A, pois segundo o teste F de Fisher, para que uma variância amostral  $s_1^2$  seja considerada diferente de uma outra variância amostral  $s_2^2$ , com dois graus de liberdade e grau de confiança de 95%:

$$F_{\nu_{1};\nu_{2}}^{1-\alpha/2} \equiv \frac{\frac{s_{1}^{2}}{\sigma_{1}^{2}}}{\frac{s_{2}^{2}}{\sigma_{2}^{2}}}; \quad \text{se } \sigma_{1}^{2} = \sigma_{2}^{2}, \text{ então} \quad F_{\nu_{1};\nu_{2}}^{1-\alpha} = \frac{s_{1}^{2}}{s_{2}^{2}} \qquad F_{2,2}^{0,95} = 19,000$$

$$\text{Ora} \quad \frac{s_{1}^{2}}{s_{2}^{2}} > 19,000 \quad \Rightarrow \quad \frac{s_{1}}{s_{2}} > 4,359 \text{ se forem diferentes}$$

$$(4.6)$$

Os vetores A e B de desvios padrões de erros experimentais são apresentados na Tabela 4.4.

Tabela 4.4: Valores de desvios padrões  $\sigma$  adotados para corromper modelo do Estudo de Caso 1.

	Desvio Padrão dos Erros Experimentais					
Vetor	$C_{A0} [kg/m^3]$	$\Theta\left[\mathrm{h}\right]$	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [kg/m^3]$	
A	10,0	0,04	10,0	10,0	10,0	
В	50,0	0,20	50,0	50,0	50,0	

De acordo com o planejamento experimental da Tabela 4.3, a condição central é gerada com três réplicas, de forma que é possível determinar médias amostrais  $\bar{x}$  e  $\bar{y}$ , bem como suas variâncias amostrais  $s_x^2$  e  $s_y^2$ . As variâncias amostrais calculadas a partir das três réplicas do ponto central foram usadas para gerar a matriz de covariância de cada conjunto de dados experimentais. Cada matriz de covariância serviu como dado de entrada para todos os procedimentos de estimação de parâmetros, adotados no presente trabalho, para cada corrida experimental. As distribuições de probabilidades adotadas em cada corrida experimental foram a distribuição uniforme, a distribuição normal e a distribuição de Weibull, detalhadas a seguir. Por fim diferentes distribuições foram usadas para avaliar o impacto que a natureza do erro experimental poderia exercer sobre os resultados finais.

#### 4.2.1 Distribuição de Probabilidade Uniforme

O algoritmo de geração dos dados pseudoexperimentais utiliza a sub-rotina do FORTRAN DRAND() para gerar números aleatórios em distribuição uniforme no intervalo  $\left[-\sqrt{3}\sigma,\,\sqrt{3}\sigma\right]$ , onde  $\sigma$  é o desvio padrão. A parametrização proposta tem o objetivo de fazer que a variância da distribuição uniforme seja igual a  $\sigma^2$ . Foram geradas duas corridas experimentais com a referida distribuição. Os dados gerados com distribuição uniforme e o vetor de desvios padrões "experimentais" A são apresentados na Tabela 4.5. Os dados gerados com distribuição uniforme e o vetor de desvios padrões "experimentais" B são apresentados na Tabela 4.6. Observam-se variações pronunciadas em relação aos valores nominais por causa do baixo número de graus de liberdade do problema. Isso mostra a dificuldade de identificar os erros a partir das medidas experimentais com baixo número de réplicas.

Tabela 4.5: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição uniforme com vetor de desvios padrões A para o Estudo de Caso 1.

Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ [h]	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [\text{kg/m}^3]$
1	1210	1,89	205	338	648
2	801	1,9	148	237	440
3	1197	0,08	970	212	16
4	802	0,08	648	153	14
5	1002	1,00	294	354	352
6	994	0,96	291	363	362
7	999	1,04	290	364	358
$\overline{z}$	998,3	1,000	291,7	360,3	357,3
$s^2$	16,33	$1,60 \times 10^{-3}$	4,33	30,33	25,33
S	4,04	0,04	2,08	5,51	5,03

Tabela 4.6: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição uniforme com vetor de desvios padrões B para o Estudo de Caso 1.

	padroes B para o Estado de Caso 1.					
Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ [h]	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [kg/m^3]$	
1	1232	1,97	214	381	658	
2	762	2,05	113	221	414	
3	1181	0,20	977	170	41	
4	844	0,10	677	173	2	
5	1000	1,06	335	357	386	
6	1013	0,87	270	355	364	
7	987	1,11	252	377	346	
$\overline{z}$	1000,0	1,013	285,7	363,0	365,3	
$s^2$	169,00	0,01603	1906,33	148,00	401,33	
S	13,00	0,13	43,66	12,17	20,03	

### 4.2.2 Distribuição de Probabilidade Normal

O algoritmo para geração dos dados pseudoexperimentais utiliza a sub-rotina do FORTRAN DRNNOF() para gerar números aleatórios com distribuição normal, média nula e desvio padrão σ conhecido. Foram geradas duas corridas experimentais com a referida distribuição. Os dados gerados com a distribuição normal e o vetor de desvios padrões experimentais A são apresentados na Tabela 4.7. Os dados gerados com a distribuição normal e o vetor de desvios padrões experimentais B são apresentados na Tabela 4.8. Vê-se uma vez mais os desvios em relação aos valores nominais e a dificuldade para identificar os erros experimentais com baixo número de graus de liberdade.

Tabela 4.7: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição normal com vetor de desvios padrão A para o Estudo de Caso 1.

Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ[h]	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [\text{kg/m}^3]$
1	1207	1,91	215	354	645
2	795	1,90	122	245	437
3	1200	0,10	954	215	8
4	811	0,13	645	159	31
5	999	0,95	305	369	375
6	975	0,99	265	353	359
7	995	1,00	291	366	371
$\overline{z}$	989,7	0,980	287,0	362,7	368,3
$s^2$	165,33	$7.0 \times 10^{-4}$	412,00	72,33	69,33
S	12,86	0,03	20,30	8,50	8,33

Tabela 4.8: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da Distribuição Normal com Vetor de Desvios padrão B para o Estudo de Caso 1.

	205,	ros pataras B pa			
Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ [h]	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [kg/m^3]$
1	1272	1,93	193	370	621
2	807	1,64	227	205	504
3	1182	0,35	973	200	0
4	795	0,21	566	158	1
5	853	1,04	261	345	393
6	943	0,87	275	309	343
7	972	0,79	259	365	369
$\overline{z}$	922,7	0,900	265,0	339,7	368,3
$s^2$	3850,33	0,01603	76,00	805,33	625,33
s	62,05	0,13	8,72	28,38	25,01

### 4.2.3 Distribuição de Probabilidade Weibull

A distribuição de Weibull é um modelo de distribuição de probabilidades biparamétrico utilizado com frequência em problemas que envolvem o tempo de vida útil de equipamentos, peças e componentes eletrônicos, dada por (WEISSTEIN, 2009):

$$P(t) = \frac{\alpha}{\beta} \cdot \left(\frac{t}{\beta}\right)^{\alpha - 1} \exp\left[-\left(\frac{t}{\beta}\right)^{\alpha}\right]$$
(4.7)

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são parâmetros do referido modelo e estão sujeitos às restrições  $\alpha > 0$  e  $\beta > 0$ . A média  $\mu$  e variância  $\sigma^2$  são dados por (WEISSTEIN, 2009):

$$\mu = \beta \cdot \Gamma \left( 1 + \frac{1}{\alpha} \right) \tag{4.8}$$

$$\sigma^2 = \beta^2 \cdot \left\{ \Gamma \left( 1 + \frac{2}{\alpha} \right) - \Gamma^2 \left( 1 + \frac{1}{\alpha} \right) \right\} \tag{4.9}$$

onde  $\Gamma(x)$  é a função Gama.

Este modelo de distribuição de probabilidade foi escolhido por permitir gerar uma distribuição assimétrica em relação à média  $\mu$ , cujo valor foi considerado igual ao valor das variáveis de saídas do modelo de reações [Equações (4.2)-(4.4)]. A consequência imediata da assimetria da distribuição de probabilidade é que o erro experimental torna-se tendencioso sempre em uma certa direção das medidas. Por exemplo, quando  $\alpha = 1,50$  e  $\beta = 1,00$ , o aspecto da distribuição de Weibull é apresentado na Figura 4-2, com média  $\mu = 0,9027$ .

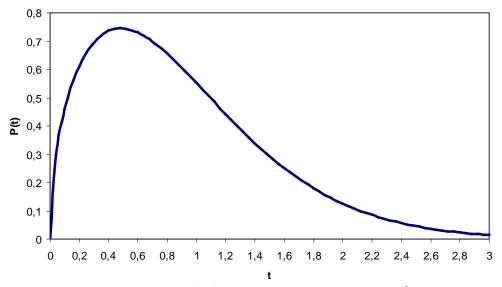


Figura 4-2: Aspecto da distribuição de Weibull com  $\alpha = 1,50$  e  $\beta = 1,00$ .

Os dados gerados com a distribuição de Weibull e o vetor de desvios padrões experimentais A são apresentados na Tabela 4.9. Os dados gerados com a distribuição de Weibull e vetor de desvios padrão experimentais B são apresentados na Tabela 4.10. As mesmas observações anteriores podem ser feitas novamente sobre os dados

experimentais. Os desvios experimentais que seguem a distribuição de Weibull foram gerados utilizando a sub-rotina do FORTRAN DRNWIB().

Tabela 4.9: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição de Weibull com o vetor de desvios padrões A para o Estudo de Caso 1.

				·	
Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ [h]	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [kg/m^3]$
1	1203	1,88	215	343	652
2	833	1,94	171	243	438
3	1224	0,11	960	218	31
4	808	0,14	651	183	17
5	1013	0,98	316	361	362
6	1026	1,02	295	362	364
7	1004	1,00	292	356	360
$\overline{z}$	1014,3	1,000	301,0	359,7	362,0
$s^2$	122,33	$4.0x10^{-4}$	171,00	10,33	4,00
S	11,06	0,02	13,08	3,21	2,00

Tabela 4.10: Dados pseudoexperimentais gerados a partir da distribuição de Weibull com o vetor de desvios padrões B para o Estudo de Caso 1.

Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ [h]	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [\text{kg/m}^3]$
1	1325	2,01	333	376	713
2	872	2,16	308	353	453
3	1251	0,34	997	244	55
4	782	0,21	664	151	49
5	1044	0,87	321	449	533
6	1093	1,44	332	373	490
7	1096	1,52	378	324	352
$\overline{z}$	1077,7	1,277	343,7	382,0	458,3
$s^2$	852,33	0,1256	914,33	3967,00	8942,33
S	29,19	0,35	30,24	62,98	94,56

#### 4.2.4 Emprego de um Modelo Equivocado

Durante a etapa de modelagem do problema, há sempre o risco de se definir um modelo matemático equivocado para representar um certo conjunto de dados experimentais, principalmente em situações em que há pouca disponibilidade de dados experimentais confiáveis. A distinção entre modelos possíveis fica fortemente prejudicada quando as variâncias dos erros de medida são significativas. Muitas vezes, o ajuste do modelo escollhido é aproximadamente válido para a faixa experimental considerada pelo plano experimental. No entanto, variáveis negligenciadas numa

determinada faixa de condições experimentais podem tornar-se significativas em outra região, acarretando desvios de predição do modelo adotado.

Para avaliar esse problema, foi simulado um equívoco de escolha de modelo a ser ajustado sobre os dados experimentais. Como modelo verdadeiro, foi considerado que a reação de geração do produto desejado B (Equação 4.3) comporta-se de acordo com o modelo cinético de *Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson* (*LHHW*) para reações heterogêneas, tendo a etapa de adsorção como etapa limitante, o que significa que a referida reação poderia ser uma reação de catálise heterogênea em fase líquida, cuja velocidade de reação é controlada pela etapa de adsorção e dessorção do reagente A. O modelo cinético de *Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson* (*LHHW*) é definido como (CARBERRY, 2001):

$$r = \frac{k_1 C_A}{1 + k_1' C_A} \tag{4.10}$$

Admitiu-se que as constantes  $k_1$  e  $k_1$ ' apresentavam os valores de 3,50 kg/(m³.h) e 5,80x10<sup>-4</sup> m³/kg respectivamente. O comportamento da velocidade de reação de geração do produto desejado B está disposto na Figura 4-3.

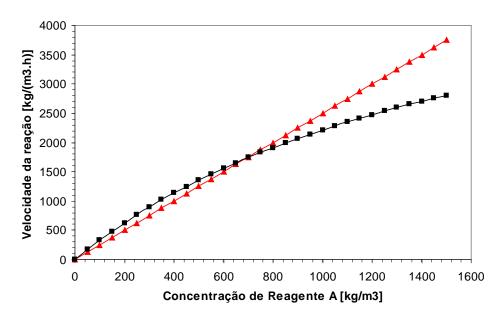


Figura 4-3: Comparação do comportamento da reação 1 descrita pela Equação (4.3), considerando: ( $\blacktriangle$ ) Equação cinética de primeira ordem; ( $\blacksquare$ ) Modelo cinético *LHHW* com  $k_I = 3,50 \text{ kg/(m}^3.\text{h})$  e  $k_I$ ' =  $5,80 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{kg}$  (Equação 4.10).

As equações derivadas para o modelo verdadeiro, em que a reação 1 segue o modelo cinético *LHHW* (Equação 4.10) são:

$$k_1'C_A^2 + (1 + k_1\Theta - k_1'C_{A0})C_A - C_{A0} = 0 (4.11)$$

cuja solução é,

$$C_{A} = \frac{-\left(1 + k_{1}\Theta - k_{1}'C_{A0}\right) \pm \sqrt{\left(1 + k_{1}\Theta - k_{1}'C_{A0}\right)^{2} + 4k_{1}'C_{A0}}}{2k_{1}'}$$
(4.12)

onde  $C_A \ge 0$ 

$$C_{B} = \frac{k_{1}\Theta C_{A}}{(1 + k_{1}'C_{A})(1 + k_{2}\Theta)}$$
(4.13)

$$C_C = \frac{k_1 k_2 \Theta^2 C_A}{(1 + k_1' C_A)(1 + k_2 \Theta)}$$
(4.14)

Note que  $C_A$  pode ter como solução um valor real positivo e outro valor real negativo, dois valores reais positivos e idênticos e dois números imaginários conjugados, porém apenas são fisicamente admissíveis como resultados com valor real positivo. Os erros experimentais foram simulados empregando a distribuição normal, como já descrito na seção anterior. Como nas outras seções, utilizaram-se os dois vetores de desvios padrões mostrados na Tabela 4.4. Os dados pseudoexperimentais gerados com o vetor de desvios padrão A e B são apresentados nas Tabelas 4.11 e 4.12, respectivamente.

Tabela 4.11: Dados pseudoexperimentais gerados com o modelo cinético *LHHW*, utilizando distribuição de probabilidade normal com o vetor de desvios padrões A para o Estudo de Caso 1.

Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ [h]	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [kg/m^3]$
1	1204	1,94	170	344	666
2	796	1,92	102	236	469
3	1195	0,08	961	197	11
4	813	0,16	632	130	0
5	1005	1,03	252	385	390
6	1000	0,91	239	368	385
7	1001	1,00	242	386	364
$\overline{z}$	1002,0	0,980	244,3	379,7	379,7
$s^2$	7,00	$3,90x10^{-3}$	46,33	102,33	190,33
S	2,65	0,06	6,81	10,12	13,80

Tabela 4.12: Dados pseudoexperimentais gerados com o modelo cinético *LHHW*, utilizando distribuição de probabilidade normal com o vetor de desvios padrões B para o Estudo de Caso 1.

Experimento	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	Θ [h]	$C_A [kg/m^3]$	$C_B [kg/m^3]$	$C_C [\text{kg/m}^3]$
1	1182	2,02	144	365	730
2	813	1,78	96	281	459
3	1258	0,24	1070	250	7
4	708	0,21	671	171	0
5	1039	1,02	250	293	339
6	974	0,85	291	358	399
7	1007	1,10	237	445	365
$\overline{\overline{z}}$	1006,7	0,990	259,3	365,3	367,7
$s^2$	1056,33	0,0163	794,33	5816,33	905,33
S	32,50	0,13	28,18	76,26	30,09

# 4.3 ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E DELIMITAÇÃO DA REGIÃO DE CONFIANÇA PARAMÉTRICA.

Como descrito na Seção 3.6 do Capítulo 3, um algoritmo híbrido que empregava o método do enxame de partículas (MEP) e o método de Newton, foi utilizado para estimar os parâmetros ótimos para cada conjunto de dados pseudoexperimentais. O procedimento de estimação de parâmetros usado fundamenta-se no método de máxima verossimilhança, com erros de medida que seguem uma dada distribuição de probabilidade, sendo a distribuição normal a mais usualmente utilizada. Admitindo-se a hipótese de que há um controle eficiente sobre a precisão das medidas de variáveis de entrada x [ou seja  $(x_{exp} - x_{modelo}) \approx 0$ ], pode-se simplificar o problema, considerando-se apenas os desvios nas variáveis de saída y durante a busca dos parâmetros do modelo que maximizam a probabilidade de ocorrência dos desvios, conforme a distribuição de probabilidades normal. O problema que admite a exclusão dos erros de medida das variáveis de entrada x denomina-se Função de Mínimos Quadrados Ponderados (FMQP), enquanto o problema mais geral que contabiliza os erros de x, é conhecido como Reconciliação de Dados (SCHWAAB e PINTO, 2007). A função objetivo de um problema de reconciliação de dados é dada pela Equação (3.11). Para o caso de FMQP, considerando que os erros de medida ocorrem apenas para as variáveis de saída y e que não há correlação entre as medidas experimentais (todas as covariâncias de medidas experimentais são nulas), a Equação (3.11) pode ser simplificada para (SCHWAAB et *al.*, 2008a):

$$F_{obj}(\varphi) = \sum_{i=1}^{NE} \sum_{j=1}^{NY} \frac{\left(y_{i,j}^* - y_{i,j}^e\right)^2}{\sigma_{i,j}^2}$$
(4.15)

onde  $y^*_{i,j}$  é a resposta do modelo para a variável de saída j na condição experimental i, definido por  $y^*_{i,j} = f(\mathbf{x}^*, \varphi)$ .

Os parâmetros de busca do algoritmo MEP (apresentado no Apêndice I) estipulados tanto para o problema de Mínimo Quadrados Ponderados (FMQP), quanto para a Reconciliação de Dados, são apresentados na Tabela 4.13. Juntamente com os parâmetros descritos na Tabela 4.13, são definidas as faixas de busca nas dimensões paramétricas. Concluída a execução do algoritmo de minimização, é encontrado um conjunto  $\{\hat{\varphi}, S(\hat{\varphi})\}$  tal que  $S(\hat{\varphi})$  é o mínimo, bem como são registrados todos os conjuntos visitados pelas partículas em cada iteração. Uma análise objetiva da qualidade da estimação de parâmetros, compreendendo o ajuste do modelo, é imprescindível para se estudar os efeitos das propriedades simuladas nos ensaios pseudoexperimentais aqui propostos. Será empregado para esta tarefa o procedimento proposto por SCHWAAB e PINTO (2007), o qual é descrito detalhadamente no Anexo G.

Tabela 4.13: Parâmetros de busca arbitrados para execução do Algoritmo MEP de estimação de parâmetros, descrito no Apêndice I, para o Estudo de Caso 1.

Parâmetro	Definição	Mínimo Quadrados Ponderados	Reconciliação de Dados
	Método de Otimização por Enxame de Partículas	3	
Nd	Número de dimensões otimizadas	2	12
Npt	Número de partículas	400	a 800
Nit	Número máximo de Iterações	16	500
C1	Parâmetro de cognição	1.	,80
C2	Parâmetro social	2.	,00
w0	Peso inercial inicial	1.	,20
wf	Peso inercial final	0.	,10
Tol_enx	Critério de parada do algoritmo do Enxame	0.	,10
Alfa	Nível de Confiança (1 - alfa)	0.	,05
	Método de Newton		
NitN	Número máximo de Iterações do Método de Newton	10	000
Pert	Perturbação usada para cálculo de derivadas	1,02	$\kappa 10^{-6}$
Ntent	Número máximo de tentativas de busca de novo ponto ótimo	2	00
Tol_N	Critério de parada do algoritmo do Newton	1,02	$\kappa 10^{-8}$

Para a análise da qualidade dos parâmetros estimados, a matriz de covariâncias paramétricas foi calculada numericamente, como é apresentada no Anexo D. No Anexo E é apresentada a aproximação linear para estimar a variância de erros de predição do modelo ajustado. A partir do cálculo aproximado matriz de covariâncias paramétricas  $\mathbf{V}_{\phi}$ , é possível apurar um planejamento sequencial ótimo, cujo resultado é a indicação de um ponto experimental adicional. Este ponto adicional é escolhido de forma a forçar a máxima contração da região de confiança paramétrica. Como critério de otimalidade foi adotado a minimização do traço da matriz  $\mathbf{V}_{\phi}$ . O algoritmo da sub-rotina de planejamento seqüencial, segundo procedimento proposto por SCHWAAB *et al.* (2008b), é apresentado no Apêndice IV.

As Tabelas 4.14 e o conjunto de Tabelas 4.15a-c contêm os principais resultados obtidos ao término da etapa de estimação de parâmetros e de delimitação das regiões de confiança paramétrica normal e da geral, empregando a Função de Mínimos Quadrados Ponderados (FMQP) e Reconciliação de Dados, respectivamente. Estão dispostas nas referidas tabelas: o número de partículas, o número de iterações executadas, os parâmetros ótimos encontrados, informações sobre a qualidade dos ajustes, o traço da matriz de covariâncias paramétricas  $\mathbf{V}_{\phi}$  e os valores extremos das regiões de confiança paramétrica normal e a região de confiança paramétrica generalizada [calculada segundo procedimento de SCHWAAB *et al.*, (2008a)]. As Figuras 4-4 a 4-19 mostram as regiões de confiança dos parâmetros estimados nos diferentes casos analisados. Nas Figuras 4-4, 4-6 e 4-8, o conjunto de pontos de cor clara em torno dos subeixos, tem o centro no ponto médio da região de confiança normal, que representa as coordenadas dos parâmetros ótimos encontrados pela estimação de parâmetros. Esses pontos foram gerados nas últimas etapas do algoritmo MEP e mostra como as partículas tendem a se concentrar em torno dos valores ótimos, à medida que a otimização avança.

Os conjuntos de dados de cor clara e em forma de cruz denotam a dinâmica da busca pelo mínimo da função objetivo. Primeiramente, os desvios relacionados a cada partícula são minimizados em relação ao subeixo do espaço paramétrico mais próximo, de forma que as partículas sofrem uma "atração" em direção aos subeixos da região de confiança. Após novas iterações, ao estarem nas vizinhanças do subeixo mais próximo, as partículas movimentam-se ao longo dos subeixos no sentido das fronteiras do espaço paramétrico para o centro dos subeixos. A Figura 4-20 traz um esquema que representa a dinâmica dominante de busca do MEP.

Tabela 4.14: Resultados da estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança para o plano experimental com 5 condições experimentais. Modelo CPO: Cinética de Primeira Ordem e FMQP: Função dos Mínimos Quadrados Ponderados.

Modelo Verdadeiro	CPO	CPO	CPO	CPO	CPO	CPO	LHHW	LHHW
Distribuição de Prob. dos Erros de medida	Uniforme	Uniforme	Normal	Normal	Weibull	Weibull	Normal	Normal
Vetor de Desvios Padrão adotado	A	В	A	В	Α	В	A	В
Tipo de Estimação de Parâmetro	FMQP	FMQP	FMQP	FMQP	FMQP	FMQP	FMQP	FMQP
Número de partículas	400	400	400	400	400	600	600	600
Número de iterações executadas	704	737	713	784	718	747	759	801
Tempo de execução (MEP + Newton) [s]	2,12	2,25	2,15	2,37	2,36	4,26	2,26	3,55
Parâmetros ótimos obtidos $k_1 [h^{-1}]$	2,6328	1,6675	2,5095	1,5899	2,3906	1,1946	2,7242	1,7590
$k_2[h^{-1}]$	0,9905	0,9643	0,9817	1,1218	0,9995	0,7805	1,0169	1,3340
Fobj	289,3	124,7	25,7	1065,0	143,9	39,4	225,5	137,0
Qualidade do Ajuste do Modelo $\chi^2_{\text{max}}$	24,7	24,7	24,7	24,7	24,7	24,7	24,7	24,7
$ar{ ho}_{\scriptscriptstyle m}$	0,99935	0,94021	0,99661	0,85346	0,99729	0,92428	0,97704	0,87994
Ajuste do Modelo é adequado?	Não	Não	Não	Não	Não	Não	Não	Não
Cte Limite Região de confiança Normal (Eq. 3.17)	169,4	73,0	15,0	623,5	84,3	23,0	132,0	80,2
Cte Limite região de confiança Generalizada (Eq.3.20)	458,7	197,7	40,8	1688,6	228,2	62,4	357,6	217,2
$Correl(k_1, k_2)$	-0,055	0,275	-0,073	-0,080	-0,415	0,076	0,059	-0,309
Traço da matriz covar. Paramétrica $tr(\mathbf{V}_{\mathbf{\Phi}})$	$3,70x10^{-4}$	$5,26x10^{-3}$	$3,92x10^{-3}$	$5,81 \times 10^{-3}$	$4,69 \times 10^{-4}$	$2,08x10^{-2}$	$2,40x10^{-3}$	$2,32x10^{-2}$
Número de pontos dentro da Reg. Confiança	89.523	155.236	80.894	290.456	72.842	219.914	164.945	241.872
Região de Confiança Normal Coordenada $k_1 [h^{-1}]$	2,4292	1,1316	2,2772	0,9750	2,1988	0,8914	2,2441	1,0697
Extrema 1 $k_2[h^{-1}]$	0,9970	0,8753	0,9852	1,2858	1,0215	0,7245	1,0029	1,332
Região de Confiança Normal Coordenada k <sub>1</sub> [h <sup>-1</sup> ]	2,8363	2,2034	2,7418	2,2048	2,5824	1,4979	3,2043	2,4842
Extrema 2 $k_2 [h^{-1}]$	0,9785	1,0453	0,9767	0,9578	0,9775	0,8275	1,0339	0,9760
Região de Confiança Normal Coordenada k <sub>1</sub> [h <sup>-1</sup> ]	2,6440	1,5201	2,5263	1,6455	2,4700	1,1716	2,6961	1,9830
Extrema 3 $k_2[h^{-1}]$	0,8455	0,6533	0,9117	-0,6742	0,9470	0,1585	0,7239	0,1780
Região de Confiança Normal Coordenada $k_1 [h^{-1}]$	2,6216	1,8150	2,4926	1,5343	2,3112	1,2086	2,7524	1,5959
Extrema 4 $k_2 [h^{-1}]$	1,1355	1,2753	1,0517	2,9178	1,0520	1,1575	1,3099	2,1760
Região de Confiança Geral Coordenada k <sub>1</sub> [h <sup>-1</sup> ]	2,4427	1,1918	2,28398	1,0543	2,2063	0,9190	2,2723	1,1107
Extrema 1 $k_2[h^{-1}]$	0,9940	0,8976	0,9869	1,1700	1,0230	0,7175	1,0032	2,0206
Região de Confiança Geral Coordenada k <sub>1</sub> [h <sup>-1</sup> ]	2,8395	2,3216	2,7567	2,4276	2,5919	1,5594	3,2714	2,8209
Extrema 2 $k_2 [h^{-1}]$	0,9805	1,0447	0,9786	1,0970	0,9777	0,8189	1,0308	1,0556
Região de Confiança Geral Coordenada k <sub>1</sub> [h <sup>-1</sup> ]	2,6451	1,5008	2,5286	1,5645	2,4725	1,1312	2,7127	1,9218
Extrema 3 $k_2 [h^{-1}]$	0,8570	0,7050	0,9145	0,2276	0,9490	0,3523	0,7686	0,5911
Região de Confiança Geral Coordenada k <sub>1</sub> [h <sup>-1</sup> ]	2,6200	1,7836	2,4844	1,7097	2,3096	1,1954	2,7513	1,4057
Extrema 4 $k_2 [h^{-1}]$	1,1503	1,3304	1,0552	>10,0 <sup>†</sup>	1,0541	1,8965	1,3697	4,2952

<sup>†</sup> Coordenada não é o ponto extremo para a região de confiança geral.  $k_2$  máximo = 10,0 devido imposição do limite da faixa de busca para o espaço paramétrico.  $F_{\text{obj}} = 1686,1 < 1688,6$ .

Tabela 4.15a: Resultados da estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança para o plano experimental com 5 pontos experimentais. Modelo CPO: Cinética de Primeira Ordem.

Modelo Verdadeiro		CPO	CPO	CPO	CPO	CPO	CPO	LHHW	LHHW
Distribuição de Prob. dos Erros de medida		Uniforme	Uniforme	Normal	Normal	Weibull	Weibull	Normal	Normal
Vetor de Desvios Padrão adotado		A	В	A	В	A	В	A	В
Tipo de Estimação de Parân	netro	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.
Número de partículas		400	400	800	600	400	600	600	600
Número de iterações executadas		1600	932	908	1051	1203	905	967	902
Tempo de execução (MEP + Newton) [s]		12,52	7,76	7,05	12,83	9,75	11,05	11,15	11,18
	$\mathbf{k}_1 [\mathbf{h}^{-1}]$	2,4755	2,0831	2,6186	2,3778	2,3748	1,3606	3,1954	3,4146
	$k_2 [h^{-1}]$	0,9956	0,9645	0,9718	1,0736	0,9835	0,7582	1,0208	1,0671
	$(C_{A0})_1$ [kg/m <sup>3</sup> ]	1204,7	1244,6	1203,3	1158,2	1215,5	1329,4	1203,5	1192,5
	$(C_{A0})_2 [kg/m^3]$	807,5	766,0	804,2	970,9	826,2	891,9	796,2	812,2
	$(C_{A0})_3 [kg/m^3]$	1198,1	1179,5	1196,9	1191,7	1213,2	1254,8	1194,1	1269,3
Parâmetros ótimos obtidos	$(C_{A0})_4 [kg/m^3]$	805,7	846,4	813,5	754,3	830,4	788,7	811,5	729,6
1 arametros oumos obtidos	$(C_{A0})_5 [kg/m^3]$	1001,1	983,6	997,7	941,2	1019,7	1081,0	1002,0	1006,8
	$\Theta_1$ [h]	1,932	1,884	1,898	1,953	1,914	2,208	1,905	2,054
	$\Theta_2$ [h]	1,861	2,026	1,899	1,525	1,896	1,694	1,960	1,793
	$\Theta_3$ [h]	0,095	0,092	0,093	0,095	0,108	0,194	0,074	0,057
	$\Theta_4$ [h]	0,099	0,139	0,108	0,139	0,133	0,148	0,083	0,034
	$\Theta_5$ [h]	0,988	1,191	1,007	1,056	1,020	1,534	0,975	0,906
	Fobj	25,9	29,6	13,1	42,1	58,0	10,2	19,9	9,3
Qualidade do Ajuste do Modelo	$\chi^2_{\text{max}}$	24,7	24,7	24,7	24,7	24,7	24,7	24,7	24,7
		0,99975	0,99704	0,99930	0,93923	0,99887	0,98036	0,99859	0,99663
Ajuste do Modelo é adequa	do?	Não	Não	Sim	Não	Não	Sim	Sim	Sim
Cte Limite Região de confiança Normal (Eq.		62,4	71,2	31,4	101,2	139,4	24,6	47,8	22,4
Cte Limite Região de confiança Generalizada	· -	88,3	100,9	44,5	143,3	197,4	34,8	67,6	31,7
$Correl(k_1, k_2)$	$\overline{ ho}_{\scriptscriptstyle m}$	0,999	0,999	0,987	0,967	0,955	0,999	0,988	0,963
Traço da matriz covar. Paramétrica	$tr(\mathbf{V}_{\varphi})$	1300,7	2010,2	1119752,9	$1,563 \times 10^8$	2319751,0	15783377	35,6	2647414
Número de pontos dentro da Reg.	Confiança	266.892	128.758	170.730	210.738	184.542	154.601	103.419	135.767
Região de Confiança Normal Coordenada	$\mathbf{k}_1 [\mathbf{h}^{-1}]$	2,3707	1,3253	2,2481	1,8565	2,1253	0,9580	2,8045	2,0737
Extrema 1	$k_2[h^{-1}]$	1,0001	0,9065	0,9803	1,1596	1,0115	0,7282	1,0128	1,2051
Região de Confiança Normal Coordenada	$k_1 [h^{-1}]$	2,5804	2,8409	2,9891	2,8991	2,6243	1,7632	3,5863	4,7555
Extrema 2	$k_2 [h^{-1}]$	0,9911	1,0225	0,9633	0,9876	0,9555	0,7882	1,0288	0,9291
Região de Confiança Normal Coordenada	k <sub>1</sub> [h <sup>-1</sup> ]	2,4807	1,9173	2,6494	2,468	2,4801	1,3380	3,1768	3,8440
Extrema 3	$k_2 [h^{-1}]$	0,9056	0,7005	0,8733	0,5776	0,9175	0,2212	0,8498	0,6361
Região de Confiança Normal Coordenada	k <sub>1</sub> [h <sup>-1</sup> ]	2,4704	2,2489	2,5878	2,2876	2,2695	1,3801	3,214	2,9852
Extrema 4	$k_2[h^{-1}]$	1,0856	1,2285	1,0703	1,5696	1,0495	1,2202	1,1918	1,4981

Tabela 4.15b: Resultados da estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança para o plano experimental com 5 pontos experimentais. Modelo CPO: Cinética de Primeira Ordem.

Modelo Verdadeiro		СРО	СРО	СРО	СРО	CPO	CPO	LHHW	LHHW
Distribuição de Prob. dos Erros de medida		Uniforme	Uniforme	Normal	Normal	Weibull	Weibull	Normal	Normal
Vetor de Desvios Padrão ado		A	В	A	В	A	В	A	В
Tipo de Estimação de Parâm		Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.
	$\mathbf{k}_{1} [\mathbf{h}^{-1}]$	2,3632	1,3423	2,2308	1,6997	2,1538	0,9161	2,6337	2,3920
	$k_2 [h^{-1}]$	0,9968	0,8498	0,9803	0,8812	0,9894	0,6608	0,9331	1,0674
	$(C_{A0})_1 [kg/m^3]$	1203,4	1258,0	1206,1	1065,1	1219,1	1283,9	1205,3	1189,1
	$(C_{A0})_2 [kg/m^3]$	807,5	744,6	789,6	838,9	833,2	871,5	796,2	813,7
	$(C_{A0})_3 [kg/m^3]$	1198,5	1209,2	1189,6	1151,7	1213,3	1226,5	1194,3	1269,2
Região de Confiança Geral Coordenada	$(C_{A0})_4 [kg/m^3]$	805,3	900,0	813,5	814,9	826,0	786,7	813,5	688,5
Extrema 1	$(C_{A0})_5 [kg/m^3]$	1002,2	1006,8	997,0	919,0	1021,9	1072,5	1000,7	1018,5
	$\Theta_1$ [h]	1,904	2,114	1,928	2,645	1,900	2,821	1,983	2,152
	$\Theta_2$ [h]	1,862	2,111	1,880	1,726	1,891	1,794	1,979	1,781
	$\Theta_3$ [h]	0,096	0,129	0,114	0,101	0,106	0,200	0,089	0,068
	$\Theta_4$ [h]	0,103	0,194	0,122	0,238	0,137	0,141	0,094	0,001
	$\Theta_5$ [h]	1,024	1,281	1,008	1,166	1,012	1,700	1,112	0,889
	$k_1 [h^{-1}]$	2,7770	3,0547	3,1169	3,0793	2,7036	1,8295	3,7229	5,6019
	$k_2 [h^{-1}]$	1,1045	0,9631	0,9532	1,0934	0,9739	1,0004	1,0168	1,0405
	$(C_{A0})_1 [kg/m^3]$	1211,7	1244,5	1200,0	1131,3	1189,8	1338,8	1202,2	1165,8
	$(C_{A0})_2 [kg/m^3]$	812,5	767,8	808,4	938,4	822,7	888,2	796,5	818,9
	$(C_{A0})_3$ [kg/m <sup>3</sup> ]	1193,9	1160,6	1179,3	1192,5	1184,4	1240,4	1194,1	1269,1
Região de Confiança Geral Coordenada	$(C_{A0})_4$ [kg/m <sup>3</sup> ]	803,5	852,5	815,9	774,4	829,7	786,6	811,3	689,2
Extrema 2	$(C_{A0})_5$ [kg/m <sup>3</sup> ]	1002,6	983,5	968,6	937,9	1010,1	1068,9	1006,4	1007,8
	$\Theta_1$ [h]	1,756	1,919	1,911	1,744	1,975	2,307	1,861	2,083
	$\Theta_2$ [h]	1,701	2,045	1,902	1,535	1,863	1,622	1,945	1,722
	$\Theta_3$ [h]	0,084	0,084	0,077	0,091	0,101	0,126	0,060	0,030
	$\Theta_4$ [h]	0,088	0,136	0,100	0,124	0,128	0,111	0,077	0,001
	$\Theta_5$ [h]	0,873	1,198	1,036	1,065	0,965	1,700	0,995	0,899

Continua na próxima página.

Tabela 4.15c: Resultados da Estimação de Parâmetros e Delimitação da Região de Confiança para Plano Experimental com 5 pontos experimentais. Modelo CPO: Cinética de Primeira Ordem.

Modelo Verdadeiro		CPO	CPO	CPO	CPO	CPO	CPO	Langmuir	Langmuir
Distribuição de Prob. dos Erros de medida		Uniforme	Uniforme	Normal	Normal	Weibull	Weibull	Normal	Normal
Vetor de Desvios Padrão adotado		A	В	A	В	A	В	A	В
Tipo de Estimação de Parâm	etro	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.	Reconc.
	$k_1 [h^{-1}]$	2,4416	1,5691	2,6119	2,4537	2,4071	1,2847	3,1561	3,5305
	$k_2 [h^{-1}]$	0,9123	0,6743	0,8779	0,6146	0,9156	0,3395	0,8626	0,7347
	$(C_{A0})_1 [kg/m^3]$	1205,9	1263,1	1206,4	1159,6	1221,3	1327,5	1203,4	1224,7
	$(C_{A0})_2 [kg/m^3]$	808,8	773,0	805,3	972,2	823,5	890,3	796,4	815,2
	$(C_{A0})_3 [kg/m^3]$	1198,1	1170,3	1199,7	1189,8	1213,7	1260,6	1194,4	1269,5
Região de Confiança Geral Coordenada	$(C_{A0})_4 [kg/m^3]$	807,0	821,4	813,1	758,4	832,3	788,0	811,3	683,8
Extrema 3	$(C_{A0})_5 [kg/m^3]$	995,6	953,0	997,5	937,7	1019,6	1085,1	1001,9	1004,4
	$\Theta_1$ [h]	1,9954	2,1991	1,8950	2,1039	1,9916	2,2960	1,9581	2,0560
	$\Theta_2$ [h]	1,8929	2,4665	1,8984	1,5666	1,9066	1,7562	1,9591	1,9364
	$\Theta_3$ [h]	0,0955	0,1358	0,0931	0,0954	0,1077	0,2063	0,0777	0,0568
	$\Theta_4$ [h]	0,0964	0,1814	0,1092	0,1370	0,1343	0,1577	0,0816	0,0010
	$\Theta_5$ [h]	0,9931	1,3701	1,0205	1,0602	1,0189	1,7000	0,9855	0,9069
	$k_1 [h^{-1}]$	2,7429	2,1500	2,6282	2,3492	2,3995	1,2901	3,1880	3,1397
	$k_2 [h^{-1}]$	1,1302	1,2887	1,0792	2,0927	1,0675	1,6900	1,2090	1,5907
	$(C_{A0})_1$ [kg/m <sup>3</sup> ]	1204,4	1236,3	1203,1	1139,4	1214,0	1325,7	1205,4	1193,3
	$(C_{A0})_2 [kg/m^3]$	807,5	743,6	803,8	964,8	825,2	881,6	796,5	779,8
	$(C_{A0})_3 [kg/m^3]$	1196,0	1207,2	1191,9	1181,4	1214,3	1259,0	1194,1	1266,6
Região de Confiança Geral Coordenada	$(C_{A0})_4 [kg/m^3]$	805,6	850,9	814,4	752,6	835,7	788,7	811,1	693,9
Extrema 4	$(C_{A0})_5 [kg/m^3]$	1005,4	1013,7	1000,5	933,2	1019,8	1090,9	1001,7	1017,5
	$\Theta_1$ [h]	1,746	1,603	1,828	1,940	1,837	2,278	1,885	2,050
	$\Theta_2$ [h]	1,720	1,764	1,910	1,487	1,877	1,503	1,947	1,791
	$\Theta_3$ [h]	0,088	0,069	0,096	0,086	0,108	0,205	0,077	0,072
	$\Theta_4$ [h]	0,089	0,201	0,109	0,138	0,131	0,140	0,085	0,001
	$\Theta_5$ [h]	0,891	1,028	0,985	1,061	1,011	1,700	0,965	0,887

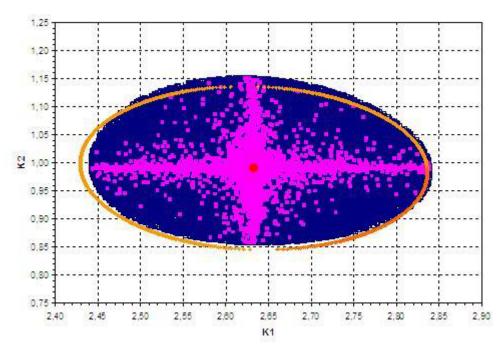


Figura 4-4: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades uniforme e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança geral que satisfaz a Equação (3.20). Os pontos quadrados claros em torno dos subeixos tendo como ponto de origem o centro da região elíptica representam a segunda metade dos conjunto de pontos do espaço paramétrico que satisfazem o critério da região de confiança generalizada, o que evidencia a dinâmica de procura dos parâmetros ótimos do MEP.

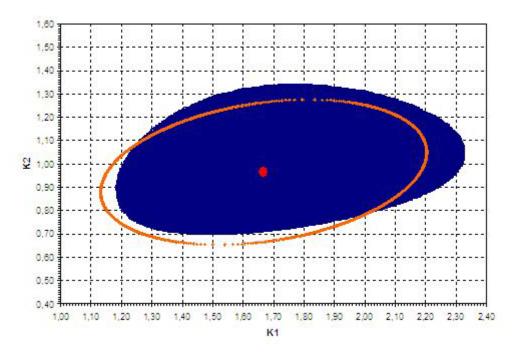


Figura 4.5: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades uniforme e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de Parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

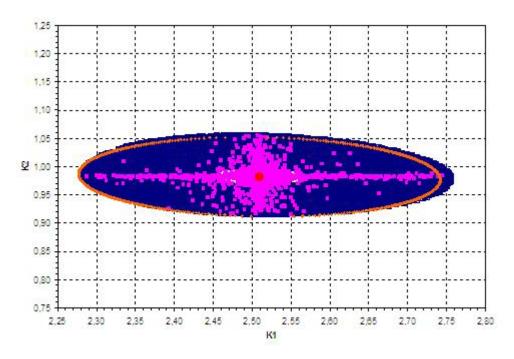


Figura 4-6: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de Parâmetros empregando FMQP.A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

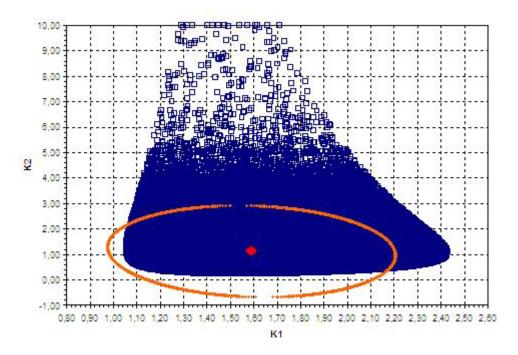


Figura 4-7: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de Parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

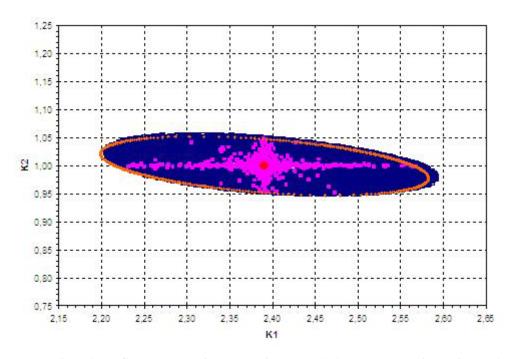


Figura 4-8: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades de Weibull e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de Parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

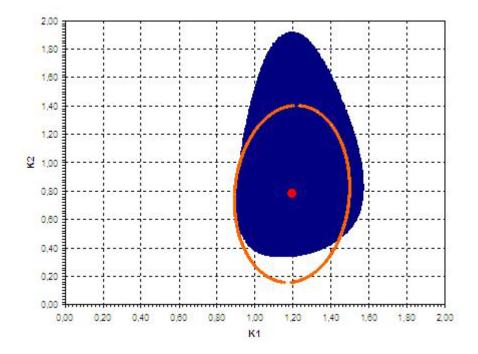


Figura 4-9: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades de Weibull e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de Parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

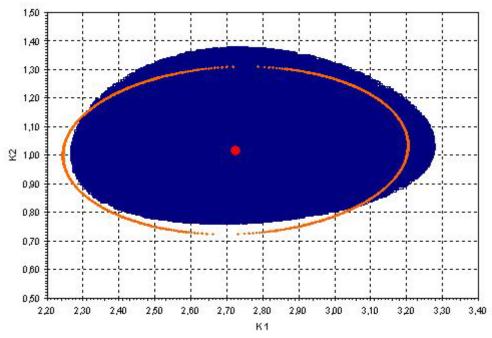


Figura 4-10: Regiões de Confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados a partir do modelo de *LHHW* com distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

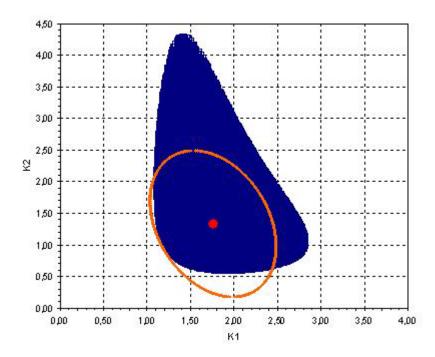


Figura 4-11: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados a partir do modelo de Langmuir com distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de parâmetros empregando FMQP. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

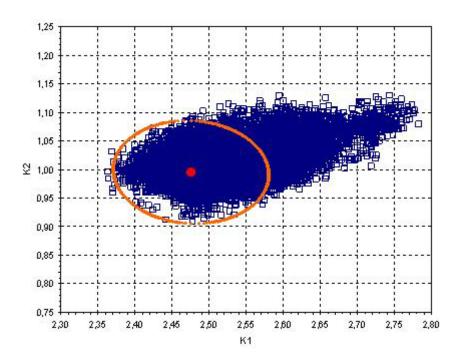


Figura 4-12: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com distribuição de probabilidades uniforme e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

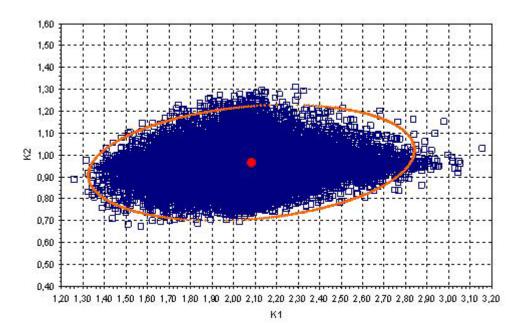


Figura 4-13: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com distribuição de probabilidades uniforme e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

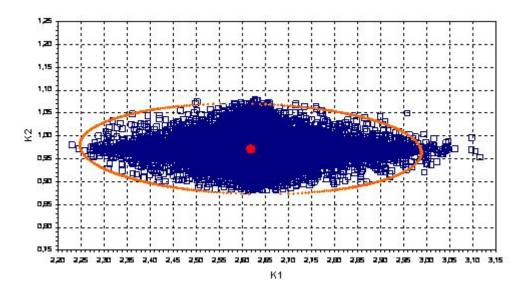


Figura 4-14: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

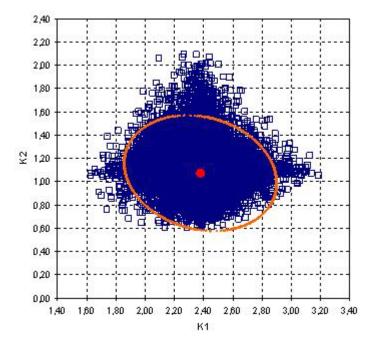


Figura 4-15: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

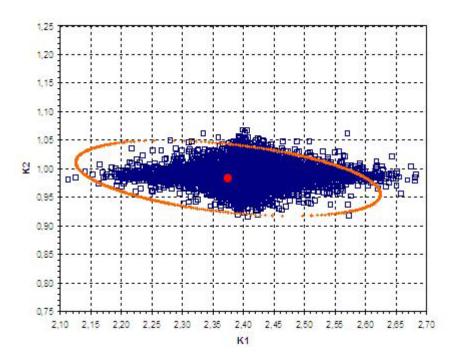


Figura 4-16: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades de Weibull e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

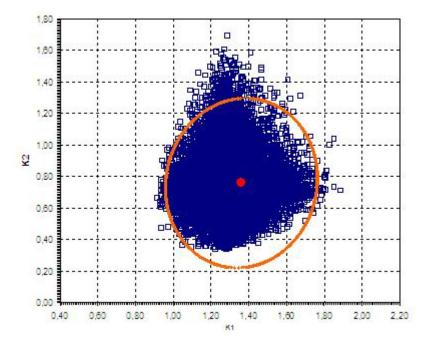


Figura 4-17: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados com a distribuição de probabilidades de Weibull e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

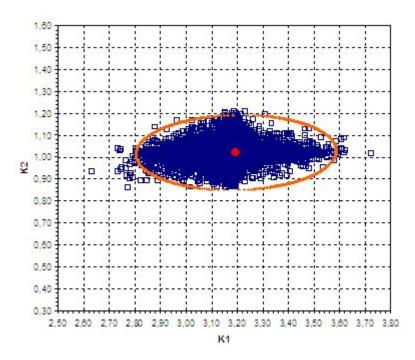


Figura 4-18: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados a partir do modelo *LHHW* com distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões A. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de Dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

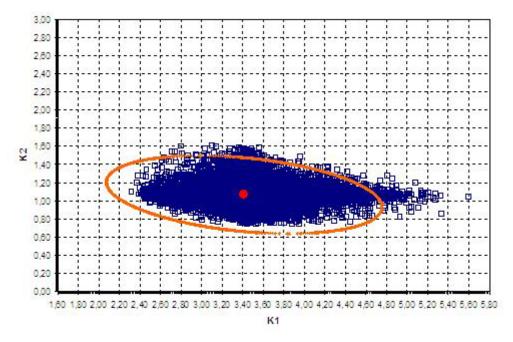


Figura 4-19: Regiões de confiança paramétrica para o ajuste com dados pseudoexperimentais gerados a partir do modelo *LHHW* com distribuição de probabilidades normal e considerando o vetor de desvios padrões B. Estimação de parâmetros empregando Reconciliação de dados. A elipse representa a região de confiança normal e a área escura, a região de confiança generalizada que satisfaz a Equação (3.20).

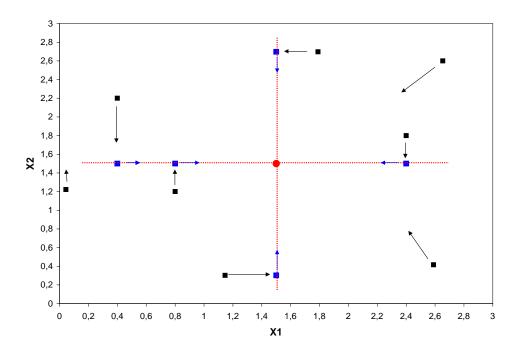


Figura 4-20: Desenho esquemático que representa a dinâmica de busca do Método do Enxame de Partículas.

## 4.3.1 Influência do erro experimental

As Figuras 4.4, 4.6, 4.8, 4.10 mostram as regiões de confiança paramétrica normal (na forma de uma elipse) resultantes da Equação (3.20). Observando-se as citadas figuras, vê-se que o formato da região paramétrica generalizada tem um padrão quase elíptico, apesar dos dados da Figura 4.4 terem sido corrompidos com erros uniformes; da Figura 4.6, corrompidos com erros normais; da Figura 4.8, corrompidos com erros que seguem a distribuição de Weibull e da Figura 4.10 terem sido ajustados com um modelo equivocado e corrompidos com erros normais. Nota-se que não é a natureza do erro que modifica de forma mais intensa a região de confiança, porém as elevadas ordens de grandeza das variâncias é que provocam as grandes deformações verificadas nas Figuras 4.5, 4.7, 4.9 e 4.11. O efeito das variâncias será discutido posteriormente.

Para comprovar a hipótese de que a influência do tipo de distribuição sobre a forma da região de confiança paramétrica geral é negligenciável, foram realizados testes t-Student para as médias amostrais dos erros de cada variável, bem como o teste  $\chi^2$  para as variâncias amostrais. Os resultados dos testes são apresentados na Tabela 4.16.

O erro é calculado como a diferença entre a medida pseudoexperimental e o valor exato do modelo verdadeiro adotado:

$$Erro(z) = z^e - z^m (4.16)$$

Todos os conjuntos de erros testados na Tabela 4.16a-c aceitam com um nível de confiança de 95% a suposição de distribuição de probabilidades normal, exceto para poucos conjuntos corrompidos com erros de distribuição de Weibull e desvios padrões elevados, devido à tendeciosidade da amostra. Amostras pequenas, como é o caso aqui de cinco experimentos com três réplicas no ponto central, não permitem a distinção do tipo de distribuição de probabilidades. SCHWAAB e PINTO (2007) mostraram que mesmo num exemplo com 40 números aleatórios gerados por uma distribuição uniforme, os testes estatísticos não permitiam distinguí-los de uma distribuição normal.

Tabela 4.16a: Erros das variáveis de entrada e de saída dos Conjuntos de dados pseudoexperimentais, sobre os quais foram testados a hipótese de serem uma distribuição normal com  $\mu = 0$  e variância  $\sigma^2$ .

Distribuição e vetor de desvios padrões utilizados	Experimento	Erro[Θ] h	Erro[ $C_{A\theta}$ ] kg/m <sup>3</sup>	$Erro[C_A]$ $kg/m^3$	Erro[C <sub>B</sub> ] kg/m <sup>3</sup>	Erro[ $C_C$ ] kg/m <sup>3</sup>
Uniforme_A	$ \begin{array}{c} 1\\2\\3\\4\\5\\\hline\overline{x}\end{array} $	-0,04 -0,02 -0,02 -0,01 0,01 -0,02 0,00	-6,0 -3,0 -1,0 1,0 4,7 -0,87 0,00	-3,7 4,3 5,3 8,0 9,1 4,59 0,00	-6,2 -3,8 -3,1 5,9 7,8 0,11 0,00	-5,8 -5,1 -1,5 -0,5 4,2 -1,75 0,00
H <sub>0</sub> : Dist Norn	$\begin{matrix} s_{Erro} \\ t \\ t_4^{\alpha=0,975} \end{matrix}$	0,02 -1,77 2,78 Verdadeiro	4,03 -0,48 2,78 Verdadeiro	5,02 2,04 2,78 Verdadeiro	6,29 0,04 2,78 Verdadeiro	4,05 -0,97 2,78 Verdadeiro
Teste χ <sup>2</sup> Uniforme_A	$\sigma^{2}$ $\chi^{2}_{\text{Erro amostral}}$ $\chi^{2}_{(\upsilon=4, 0,975)}$ $\chi^{2}_{(\upsilon=4, 0,025)}$	0,0016 0,939 11,143 0,484	100,00 0,650 11,143 0,484	100,00 1,008 11,143 0,484	100,00 1,584 11,143 0,484	100,00 0,655 11,143 0,484
H <sub>0</sub> : Dist. Norm	nal com $s^2 = \sigma^2$	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro

Continua na página seguinte

Tabela 4.16b-CONTINUAÇÃO: Erro das variáveis de entrada e de saída dos Conjuntos de dados pseudoexperimentais, sobre os quais foram testados a hipótese de serem uma distribuição normal com  $\mu=0$  e variância  $\sigma^2$ .

		μυ	e variancia o	•		
Distribuição e						
vetor de		Erro[Θ]	$\text{Erro}[C_{A0}]$	$\text{Erro}[C_A]$	$\text{Erro}[C_B]$	$\text{Erro}[C_C]$
desvios	Experimento	h			$kg/m^3$	-
padrões		11	Kg/III	Kg/III	Kg/III	Kg/III
utilizados						
	1	-0,13	-38,0	-33,7		-19,0
	2	0,00	-19,0			
	3	0,06	-13,0	-15,7		-11,1
	4	0,07	0,0	5,3	-0,1	6,9
Uniforme_B	5	0,12	29,7	34,4		18,9
Cimornic_B	$\overline{x}$	0,02	-8,07			-3,39
	μ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	S	0,10	25,14			15,71
	t	0,56	-0,72	-0,58		-0,48
	$t_4^{\alpha=0,975}$	2,78	2,78			2,78
H <sub>0</sub> : Dist Norn		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro
	$\sigma^2$	0,0400	2500,00	2500,00	2500,00	2500,00
Teste $\chi^2$	χ <sup>2</sup> Erro amostral	0,923	1,012	1,209		0,395
Uniforme_B	$\chi^2_{(\upsilon=4, 0,975)}$	11,143	11,143	11,143	11,143	11,143
	$\chi^2_{(v=4, 0,025)}$		0,484			
H <sub>0</sub> : Dist. Norm	$al com s^2 = \sigma^2$					
	1	-0,05	-25,0		,	,
	2	-0,01	-5,0			
	3	0,00	-5,0			
	4	0,00	-1,0			
Normal_A	5	0,01				
140111141_71	$\overline{x}$	-0,01	-6,00			
	μ	0,00	0,00			
	S	0,02	11,53	13,48		11,02
	t	-0,86	-1,16	-0,95	1,44	0,15
	$t_4^{\alpha=0,975}$	2,78	2,78	2,78	2,78	2,78
H <sub>0</sub> : Dist Norn		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro
	$\sigma^2$	0,0016	100,00	100,00	100,00	100,00
Teste $\chi^2$	χ <sup>2</sup> Erro amostral	1,464	5,320	7,264	2,971	4,857
Normal_A	$\chi^2_{(\upsilon=4, 0,975)}$	11,143	11,143	11,143	11,143	11,143
	$\chi^2_{(\upsilon=4, 0,025)}$	0,484	0,484	0,484	0,484	0,484
H <sub>0</sub> : Dist. Norm		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro
	1	-0,26	-147,0	-74,0	-48,1	-28,5
	2	-0,21	-57,0	-26,7	-22,9	-21,8
	3	-0,13	-28,0	-24,7	-18,2	-14,1
	4	0,03	-18,0	-15,7	-12,1	-13,5
Normal_B	5	0,13	24,7	30,1	16,2	39,6
Ttormai_D	$\overline{x}$	-0,09	-45,07	-22,21	-17,03	-7,68
	μ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	S	0,17	64,07	37,02	23,08	27,12
	t	-1,18	-1,57	-1,34	-1,65	-0,63
	$t_4^{\alpha=0,975}$	2,78	2,78	2,78	2,78	2,78
$H_0$ : Dist Normal com $\mu = 0$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro

Continua na página seguinte

Tabela 4.16c – CONTINUAÇÃO: Erro das variáveis de entrada e de saída dos Conjuntos de dados pseudoexperimentais, sobre os quais foram testados a hipótese de serem uma distribuição normal com  $\mu = 0$  e variância  $\sigma^2$ .

		μυ	e variancia σ	•		
Distribuicão e vetor de desvios padrões utilizados	Experimento	Erro[Θ] h	Erro[ $C_{A\theta}$ ] kg/m <sup>3</sup>	$ Erro[C_A]  kg/m3 $		Erro[ $C_C$ ] kg/m <sup>3</sup>
	$\sigma^2$		2500,00	2500,00	2500,00	2500,00
_ 2		0,0400				
Teste $\chi^2$	$\chi^2$ Erro amostral	2,729	6,568	2,193	0,852	1,177
Normal_B	$\chi^2_{(\upsilon=4, 0,975)}$	11,143	11,143	11,143	11,143	11,143
	$\chi^2_{(v=4, 0,025)}$	0,484	0,484	0,484	0,484	0,484
H <sub>0</sub> : Dist. Norm	$al com s^2 = \sigma^2$			Verdadeiro		
	1	-0,02	3,0	0,0	-1,1	2,5
	2	-0,02	4,0	6,3	-0,2	2,5
	3	0,00	8,0	6,3	1,2	2,9
	4	0,01	13,0	9,3	3,9	4,9
Weibull_A	5	0,03	27,7			7,0
W Cloun_71	$\overline{x}$	0,00	11,13	9,25	4,58	3,94
	μ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	S	0,02	10,05	9,11	8,37	1,98
	t	0,07	2,48	2,27	1,22	4,45
$t_4^{\alpha=0,975}$		2,78	2,78	2,78	2,78	2,78
H <sub>0</sub> : Dist Norm		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Falso
	$\sigma^2$	0,0064	400,00	400,00	400,00	400,00
Teste $\chi^2$	$\chi^2$ Erro amostral	0,314	1,009	0,830	0,701	0,039
Weibull_A	$\chi^2_{(\upsilon=4, 0,975)}$	11,143	11,143	11,143	11,143	11,143
	$\chi^2_{(\upsilon=4, 0,025)}$	0,484	0,484	0,484	0,484	0,484
H <sub>0</sub> : Dist. Norm	$aal com s^2 = \sigma^2$	Falso	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Falso
	1	-0,13	-18,0	24,0	-33,1	-5,1
	2	0,11	44,0	35,3	5,5	20,0
	3	0,11	51,0	37,0	15,9	33,2
	4	0,24	72,0	46,3	25,8	34,5
W '1 11 D	5	0,41	104,7	128,5	83,7	124,1
Weibull_B	$\overline{x}$	0,15	50,73	54,21	19,56	41,32
	μ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	S	0,20	45,09	42,27	42,26	48,93
	t	1,67	2,52	2,87	1,03	1,89
	$t_4^{\alpha=0,975}$	2,78	2,78	2,78	2,78	2,78
H <sub>0</sub> : Dist Norm	$H_0$ : Dist Normal com $\mu = 0$		Verdadeiro	Falso	Verdadeiro	Verdadeiro
	$\sigma^2$	0,1600	10000,00	10000,00	10000,00	10000,00
Teste $\chi^2$	$\chi^2_{\text{Erro amostral}}$	0,972	0,813	0,715	0,714	0,958
Weibull_B	$\chi^2_{(\upsilon=4, 0.975)}$	11,143	11,143	11,143	11,143	11,143
	$\chi^{2}_{(\upsilon=4, 0,025)}$	0,484	0,484	0,484	0,484	0,484
H <sub>0</sub> : Dist. Norm	$al com s^2 = \sigma^2$	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro

Nota-se, portanto, que o fator que controla a indistinguibilidade entre uma distribuição de probabilidade e a distribuição normal é fundamentalmente o tamanho da

amostra, embora o grau de dispersão dos dados também contribua com a maior facilidade de discriminação dos erros.

De acordo o Teorema de Berry-Esseen, a diferença máxima entre uma determinada distribuição de probabilidades acumulada e a distribuição acumulada normal é ditada pelo módulo do terceiro momento. O Teorema de Berry-Esseen pode ser apresentado na forma que segue.

**Teorema Berry-Esseen** (KOLASSA, 1997): Seja  $\{Y_n\}$  uma seqüência de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com= 0 e  $\sigma$   $^2=1$ . Sendo  $Z=\sum_{j=1}^n\frac{Y_j}{\sigma\sqrt{n}}$  e  $F_Z(z)=P[Z\leq z]$ . Suponha adicionalmente que  $\rho=E\left|Y_j\right|^3$   $<\infty$  e  $\Phi$  é a

distribuição de probabilidades acumulada normal. Então:

$$\left| F_Z - \Phi \right| \le \frac{C\rho}{\sqrt{n}} \tag{4.17}$$

onde C é uma constante independente das distribuições das variáveis  $Y_n$ , cujo valor pode ser tomado como sendo S. A prova do presente teorema encontra-se no Anexo S.

A consequência do Teorema Berry-Esseen é que uma distribuição de probabilidade qualquer somente é distinguida da distribuição normal quando apresenta pontos sorteados durante a amostragem nas extremidades das distribuições, onde se concentram as maiores diferenças da probabilidade esperada. Quanto mais pontos nas caudas (informação sobre eventos raros), maior a soma dos desvios e, portanto, a hipótese de indistinguibilidade entre elas pode ser rejeitada com mais facilidade pela aplicação do teste qui quadrado. O teorema relaciona este maior número de pontos nas caudas com a medida da soma em módulo dos desvios em relação à média amostral ao cubo, denominada de terceiro momento amostral. Portanto, a distinção de distribuições é diretamente relacionada com a maior diferença entre as distribuições nas extremidades e o tamanho da amostra, pois há maiores chances de sortear valores localizados nas caudas das distribuições quando o número de pontos amostrados aumenta. A Figura 4.21 ilustra que os conjuntos de erros gerados pela distribuição de Weibull podem ser distinguidos com mais facilidade da curva normal que a distribuição uniforme, já há

maior diferença nas probabilidades acumuladas esperadas entre as distribuições de Weibull e a normal.

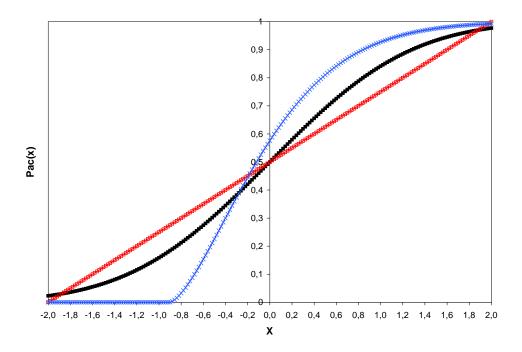


Figura 4-21: Comparação das funções de distribuição de probabilidades acumulada Normal (■), Uniforme (□) e de Weibull (x) para os desvios padrões do vetor A.

É importante observar que o processo de estimação de parâmetros efetua uma espécie de filtragem dos ruídos aleatórios, em que os erros de várias medidas, supostamente, independentes são somados e minimizados através de uma função objetivo. O Teorema do Limite Central garante que a soma de números aleatórios gerados de acordo uma distribuição de probabilidades qualquer tende para a distribuição normal, à medida que aumenta a quantidade de parcelas da soma de valores aleatórios, independentemente de qual seja a sua distribuição de probabilidades. Portanto, não surpreende que o resultado do processo de estimação depende pouco da natureza do erro experimental, principalmente para situações em que existem poucos dados experimentais disponíveis.

Por outro lado, quanto maior o número de pontos experimentais com réplicas, maior será a informação disponível sobre a variabilidade do erro experimental e consequentemente, mais fácil será distinguir qual é a verdadeira distribuição de probabilidades do erro experimental e o formato dela. A Tabela 4.17a-b demonstra que a pequena quantidade de pontos experimentais corrobora para que o erro experimental seja indistinguível e possa ser considerado normal, independente da distribuição de probabilidades que gerou estes dados experimentais.

Tabela 4.17a: Teste  $\chi^2$  das variâncias amostrais provenientes das 3 réplicas do ponto central de cada conjunto de dados pseudoexperimentais e que foram adotadas no cálculo da função objetivo da FMQP e da Reconciliação de Dados.

^		da Reconcilia			2	2
Teste $\chi^2$					$C_{\rm B}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	
	$s^2$	0,0016	16,33	4,33	30,33	25,33
	$\sigma^2$	0,0016	100	100	100	
CPO_Uniforme_A	$   \begin{array}{c}     \upsilon \\     \chi^2   \end{array} $	2	2	2	2	_
0.0_0		2,000	0,327	0,087	0,607	0,507
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,975)	7,378	7,378	7,378	7,378	7,378
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,025)	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
$H_0: s^2 = \sigma^2$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro
	$s^2$	0,0160	169,00	1906,33	148,00	401,33
	$\sigma^2$	0,04	2500	2500	2500	2500
CPO_Uniforme_B		2	2	2	2	2
CI O_OIIIOIIIIC_B	$\chi^2$	0,802	0,135	1,525	0,118	0,321
	$\chi^2_{(v, 0,975)}$	7,378	7,378	7,378	7,378	7,378
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,025)	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
$H_0: s^2 = \sigma^2$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro
	s <sup>2</sup>	0,0007	165,33	412,00	72,33	69,33
	$\sigma^2$	0,0016	100	100	100	100
CPO_Normal_A	υ	2	2	2	2	2
CI O_NOIMai_A	$\chi^2$	0,875	3,307	8,240	1,447	1,387
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,975)	7,378	7,378	7,378	7,378	7,378
	$\chi^2_{(v, 0,025)}$	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
$H_0: s^2 = \sigma^2$		Verdadeiro	Verdadeiro	Falso	Verdadeiro	Verdadeiro
	$s^2$	0,0163	3850,33	76,00	805,33	625,33
	$\sigma^2$	0,04	2500	2500	2500	2500
CPO_Normal_B	$ \frac{\upsilon}{\chi^2} $	2	2	2	2	2
CI O_Normai_b		0,815	3,080	0,061	0,644	0,500
	$\chi^{2}_{(v, 0,975)}$	7,378	7,378	7,378	7,378	7,378
	$\chi^2_{(v, 0,025)}$	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
$H_0: s^2 = \sigma^2$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro
	$s^2$	0,0004	122,33	171,00	10,33	4,00
	$\sigma^2$	0,0064	400	400	400	400
CPO_Weibull_C	υ	2	2	2	2	2
CI O_Welbuil_C	$\chi^2$	0,125	0,612	0,855	0,052	0,020
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,975)	7,378	7,378	7,378	7,378	7,378
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,025)	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
$H_0: s^2 = \sigma^2$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Falso
	$s^2$	0,1256	852,33	914,33	3967,00	8942,33
	$\sigma^2$	0,16	10000	10000	10000	10000
CPO_Weibull_D	υ	2	2	2	2	2
CI O_WCIUUII_D	$\chi^2$	1,570	0,170	0,183	0,793	1,788
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,975)	7,378	7,378	7,378	7,378	7,378
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,025)	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
$H_0: s^2 = \sigma^2$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro
				Contin	uo no nógin	

Continua na página seguinte

Tabela 4.17b – Continuação: Teste  $\chi^2$  das variâncias amostrais provenientes das 3 réplicas do ponto central de cada conjunto de dados pseudoexperimentais e que foram adotadas no cálculo da função objetivo da FMQP e da Reconciliação de Dados.

Teste χ2	J	Θ [h]	$C_{A0}$ [kg/m <sup>3</sup> ]		$C_{\rm B}$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$C_{\rm C}$ [kg/m <sup>3</sup> ]
	$s^2$	0,0039	7,00	46,33	102,33	190,33
	$\sigma^2$	0,0016	100	100	100	100
LHHW_Normal_A	υ	2	2	2	2	2
LITHW_NOTHIAI_A	$\chi^2$	4,875	0,140	0,927	2,047	3,807
	$\chi^2_{(v, 0,975)}$	7,378	7,378	7,378	7,378	7,378
	$\chi^{2}_{(v, 0,025)}$	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
$H_0: s^2 = \sigma^2$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro
	$s^2$	0,0163	1056,33	794,33	5816,33	905,33
	$\sigma^2$	0,04	2500	2500	2500	2500
LIHIW Normal D	υ	2	2	2	2	2
LHHW_Normal_B	$\chi^2$	0,815	0,845	0,635	4,653	0,724
	χ <sup>2</sup> (υ, 0,975)	7,378	7,378	7,378	7,378	7,378
	$\chi^2_{(v, 0,025)}$	0,051	0,051	0,051	0,051	0,051
$H_0: s^2 = \sigma^2$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro

As Figuras 4.4-19 mostram, no entanto, que a magnitude do erro experimental afeta bastante a forma da região de confiança paramétrica, principalmente para estimações por FMQP. Como poderia ser esperado, quanto maior a variância das variáveis de entrada e de saída, maiores são as incertezas dos parâmetros do modelo e mais ampla e complexa é a região de confiança paramétrica.

Um efeito importante observado está associado à média amostral dos erros, admitidos sempre por hipótese como proveniente de uma população de erros com  $\mu=0$ . Foi mostrado que a média amostral dos erros de todas as variáveis de entrada e saída são estatisticamente equivalentes à distribuição normal com  $\mu=0$  (Tabela 4.16). Todavia, o bias associado ao erro de cada ponto pseudoexperimental pode afetar o cálculo da função objetivo. Por exemplo, um bias positivo na variável de entrada  $C_{A0}$  pode levar o MEP a encontrar uma coordenada de parâmetros em que  $k_1$  é subestimado em relação ao valor verdadeiro. Dependendo do modelo, o efeito das perturbações pode ser amplificado ou amortizado na forma de incertezas dos parâmetros.

Além disso, o parâmetro real varia numa faixa que não é simétrica. Por exemplo, os valores de  $k_1$  e  $k_2$  não podem ser negativos para quaisquer valores medidos admissíveis das variáveis físicas. Portanto, os desvios positivos de  $k_1$  e  $k_2$  são muito mais prováveis do que os desvios negativos dos parâmetros. Esse efeito pode ser corroborado nas Figuras 4.4-19. Em especial, quando os erros admissíveis são grandes. Esse efeito

pode ser observado mesmo quando a estimação é feita com auxílio do procedimento de reconciliação de dados.

Como a estimação de parâmetros por FMQP ignora qualquer variabilidade das variáveis de entrada, as Figuras 4.7, 4.9 e 4.11 mostram que as regiões de confiança paramétrica podem ficar fortemente deformadas em uma dada direção do espaço paramétrico (no presente caso, na direção  $k_2$  mais altos), quando os erros das variáveis independentes são grandes, entretanto são ignorados. Comparando-se as Figuras 4.7 e 4.15, 4.9 e 4.17, 4.11 e 4.19, verifica-se que a negligência dos erros das variáveis de entrada da estimação por FMQP foi a principal razão para as grandes deformações observadas, as quais praticamente desapareceram para todos os casos em que a estimação foi feita com Reconciliação de Dados.

Os comentários apresentados podem ser validados pelas demonstrações que seguem. Seja  $F_{obj}$  a função objetivo da estimação de parâmetros por reconciliação de dados, dada na forma matricial pela Equação (3.11). Admitindo que um pequeno erro é introduzido na função objetivo, pode-se propor a aproximação linear em série de Taylor:

$$F_{obj}\left(\varphi_{0} + \delta\varphi, \mathbf{X}_{0}^{m} + \delta\mathbf{X}^{m}, \mathbf{X} + \varepsilon_{X}, \mathbf{Y} + \varepsilon_{Y}\right) \approx F_{obj}\left(\varphi_{0}, \mathbf{X}_{0}^{m}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}\right) + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial\varphi}\right)_{0} \delta\varphi + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial\mathbf{X}^{m}}\right)_{0} \delta\mathbf{X}^{m} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial\mathbf{X}}\right)_{0} \varepsilon_{X} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial\mathbf{Y}}\right)_{0} \varepsilon_{Y}$$

$$(4.18)$$

onde  $\mathbf{X}^{m}$  é a matriz de parâmetros reconciliados para as variáveis de entrada,  $\mathbf{X}$  e  $\mathbf{Y}$  são respectivamente matriz de pontos experimentais das variáveis de entrada e de saída. Na fronteira da região de confiança paramétrica generalizada, a desigualdade dada pela Equação (3.20) torna-se:

$$F_{obj}(\varphi_b, \mathbf{X}_b^m, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) = F_{obj}(\hat{\varphi}, \hat{\mathbf{X}}^m, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) \cdot C(n, p, \alpha)$$
(4.19)

onde b representa a condição em ponto qualquer da fronteira da região de confiança paramétrica,  $\hat{\xi} = \{\hat{\varphi}, \hat{\mathbf{X}}^m\}$  é o vetor de parâmetros ótimos encontrados pela reconciliação de dados e  $C(n, p, \alpha) > 1$  é uma constante que depende do número de experimentos realizados n, do número de parâmetros do modelo p e do nível de confiança adotado (1

 $-\alpha$ ). Supondo que pequenas perturbações devidas ao erro experimental ocorrem nas variáveis de entrad $\mathbf{z}_X$  e nas variáveis de saí $\mathbf{z}_X$  que provocam um pequeno deslocamento da solução ótima dos parâmetros  $\delta\hat{\boldsymbol{\xi}} \equiv \left\{\delta\hat{\boldsymbol{\varphi}}, \delta\hat{\mathbf{X}}^m\right\}$  e uma deformação da fronteira da região de confiança paramétrica  $\delta\boldsymbol{\xi} \equiv \left\{\delta\boldsymbol{\varphi}, \delta\mathbf{X}^m\right\}$ . A Equação (4.19) pode ser re-escrita como:

$$F_{obj}(\varphi_{b} + \delta\varphi, \mathbf{X}_{b}^{m} + \delta\mathbf{X}^{m}, \mathbf{X} + \varepsilon_{X}, \mathbf{Y} + \varepsilon_{Y}) =$$

$$= F_{obj}(\hat{\varphi} + \delta\hat{\varphi}, \hat{\mathbf{X}}_{b}^{m} + \delta\hat{\mathbf{X}}^{m}, \mathbf{X} + \varepsilon_{X}, \mathbf{Y} + \varepsilon_{Y}) \cdot C$$

$$(4.20)$$

Substituindo Equação (4.18) na Equação (4.20):

$$F_{obj}(\varphi_{b}, \mathbf{X}_{b}^{m}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \varphi}\right)_{b} \delta \varphi + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}^{m}}\right)_{b} \delta \mathbf{X}^{m} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{b} \varepsilon_{X} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{b} \varepsilon_{X} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{b} \varepsilon_{Y} = \begin{bmatrix} F_{obj}(\hat{\varphi}, \hat{\mathbf{X}}^{m}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \varphi}\right)_{\hat{\xi}} \delta \hat{\varphi} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}^{m}}\right)_{\hat{\xi}} \delta \hat{\mathbf{X}}^{m} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{\hat{\xi}} \varepsilon_{X} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{\hat{\xi}} \varepsilon_{Y} \end{bmatrix} \varepsilon_{Y}$$

$$(4.21)$$

Subtraindo a Equação (4.21) da Equação (4.19), chega-se que:

$$\left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \varphi}\right)_{b} \delta \varphi + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}^{m}}\right)_{b} \delta \mathbf{X}^{m} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{b} \varepsilon_{X} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{b} \varepsilon_{Y} =$$

$$= \begin{bmatrix}
\left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \varphi}\right)_{\hat{\xi}} \delta \hat{\varphi} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}^{m}}\right)_{\hat{\xi}} \delta \hat{\mathbf{X}}^{m} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{\hat{\xi}} \varepsilon_{X} + 
\\
+ \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{\hat{\xi}} \varepsilon_{Y}
\end{bmatrix} \cdot \mathbf{C} \tag{4.22}$$

Como demonstrado no Anexo D, variações em torno do ponto ótimo satisfazem a Equação (D.6):

$$\mathbf{G}_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{\varepsilon}_{\mathbf{Y}} + \mathbf{G}_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{\varepsilon}_{\mathbf{X}} + \mathbf{H}_{\xi} \cdot \delta \hat{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{0}$$
 (4.23)

Substituindo a Equação (4.23) na Equação (4.22):

$$\left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \boldsymbol{\varphi}}\right)_{b} \delta \boldsymbol{\varphi} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}^{m}}\right)_{b} \delta \mathbf{X}^{m} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{b} \varepsilon_{X} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{b} \varepsilon_{Y} = \begin{cases} -\left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)_{\hat{\xi}} \cdot \mathbf{H}^{-1} \cdot \left(\mathbf{G}_{Y} \varepsilon_{Y} + \mathbf{G}_{X} \varepsilon_{X}\right) + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{\hat{\xi}} \varepsilon_{X} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{\hat{\xi}} \varepsilon_{Y} \end{cases} \\
+ \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{b} \varepsilon_{Y} = \begin{cases} -\left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \boldsymbol{\xi}}\right)_{\hat{\xi}} \cdot \mathbf{H}^{-1} \cdot \left(\mathbf{G}_{Y} \varepsilon_{Y} + \mathbf{G}_{X} \varepsilon_{X}\right) + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{\hat{\xi}} \varepsilon_{X} + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{\hat{\xi}} \varepsilon_{Y} \end{cases}$$

$$(4.24)$$

Rearranjando a Equação (4.24):

$$\left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \varphi}\right)_{b} \delta \varphi + \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}^{m}}\right)_{b} \delta \mathbf{X}^{m} = -C \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \xi}\right)_{\hat{\xi}} \cdot \mathbf{H}^{-1} \cdot \left(\mathbf{G}_{Y} \varepsilon_{Y} + \mathbf{G}_{X} \varepsilon_{X}\right) + \left[C \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{\hat{\xi}} - \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}}\right)_{b}\right] \varepsilon_{X} + \left[C \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{\hat{\xi}} - \left(\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}}\right)_{b}\right] \varepsilon_{Y} \tag{4.25}$$

Sabe-se que:

$$\frac{\partial F_{obj}}{\partial \varphi} = -2 \left[ \mathbf{Y} - \mathbf{f} \left( \varphi, \mathbf{X}^m \right) \right]^T \mathbf{V}_Y^{-1} \frac{\partial \mathbf{f} \left( \varphi, \mathbf{X}^m \right)}{\partial \varphi}$$
(4.26)

$$\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}^{m}} = -2\left[\mathbf{Y} - \mathbf{f}\left(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{X}^{m}\right)\right]^{T} \mathbf{V}_{Y}^{-1} \frac{\partial \mathbf{f}\left(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{X}^{m}\right)}{\partial \mathbf{X}^{m}} - 2\left[\mathbf{X} - \mathbf{X}^{m}\right]^{T} \mathbf{V}_{X}^{-1}$$
(4.27)

$$\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{Y}} = 2[\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\xi)]^T \cdot \mathbf{V}_Y^{-1}$$
(4.28)

$$\frac{\partial F_{obj}}{\partial \mathbf{X}} = 2 \left[ \mathbf{X} - \mathbf{X}^m \right]^T \cdot \mathbf{V}_X^{-1} \tag{4.29}$$

$$-\left[\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\boldsymbol{\varphi}_{b}, \mathbf{X}_{b}^{m})\right]^{T} \mathbf{V}_{Y}^{-1} \left[ \frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\varphi}_{b}, \mathbf{X}_{b}^{m})}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \delta \boldsymbol{\varphi} + \frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\varphi}_{b}, \mathbf{X}_{b}^{m})}{\partial \mathbf{X}^{m}} \delta \mathbf{X}^{m} \right] +$$

$$-\left[\mathbf{X} - \mathbf{X}_{b}^{m}\right]^{T} \mathbf{V}_{X}^{-1} \delta \mathbf{X}^{m} = C \begin{bmatrix} \left[\mathbf{Y} - \mathbf{f}(\hat{\boldsymbol{\varphi}}, \hat{\mathbf{X}}^{m})\right]^{T} \mathbf{V}_{Y}^{-1} & \frac{\partial \mathbf{f}(\hat{\boldsymbol{\varphi}}, \hat{\mathbf{X}}^{m})}{\partial \boldsymbol{\xi}} + \\ \left[\mathbf{X} - \hat{\mathbf{X}}^{m}\right]^{T} \mathbf{V}_{X}^{-1} & \\ \times \mathbf{H}^{-1} \cdot \left(\mathbf{G}_{Y} \boldsymbol{\varepsilon}_{Y} + \mathbf{G}_{X} \boldsymbol{\varepsilon}_{X}\right) + \\ + \left[\left(C - 1\right)\mathbf{X} - C\hat{\mathbf{X}}^{m} + \mathbf{X}_{b}^{m}\right]^{T} \mathbf{V}_{X}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}_{X} + \\ + \left[\left(C - 1\right)\mathbf{Y} - C\mathbf{f}(\hat{\boldsymbol{\varphi}}, \hat{\mathbf{X}}^{m}) + \mathbf{f}(\boldsymbol{\varphi}_{b}, \mathbf{X}_{b}^{m})\right]^{T} \mathbf{V}_{Y}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}_{Y}$$

$$(4.30)$$

Analisando a Equação (4.30), percebe-se que o procedimento de reconciliação de dados amortece as perturbações  $\epsilon_{X}$ , referentes ao lado esquerdo da equação, sobre os parâmetros do modelo por meio do terêno  $\mathbf{f}/\partial\mathbf{X}^m$  e demais termos com  $\delta\mathbf{X}^m$ . Na estimação por FMQP, tais perturbações nas variáveis de entrada geram bias nos parâmetros estimados. Comparando os parâmetros ótimos encontrados por FMQP (Tabela 4.14) com os encontrados por reconciliação de dados (Tabela 4.15a), verificase, em todos os casos, que estes últimos são mais próximos dos valores verdadeiros do que aqueles.

Como o critério da região de confiança paramétrica generalizada, expresso pela Equação (3.20), é aplicado diretamente sobre a função objetivo, este proporciona graus de liberdade para o modelo dar os contornos da região de confiança, ao contrário do conceito rígido de hiperelipsóide definido pela região de confiança paramétrica normal (Equação 3.17). As direções preferenciais no espaço paramétrico para as deformações das fronteiras da região de confiança paramétrica são principalmente comandadas pelos módulos e sinais das derivadas  $\frac{\partial F_{obj}}{\partial \xi}$ . O uso da região de confiança normal não é recomendado, pois inibe o comportamento do modelo forçando o formato hiperelipsóide para todas as Figuras.

Apesar da natureza dos erros associados aos sinais experimentais não afetarem muito o problema de estimação de parâmetros, isso não significa dizer que a região de confiança paramétrica apresenta uma forma trivial. Como mostrado nas Figuras 4.4-19, a região de confiança paramétrica pode apresentar formas bastante diferentes da elipse usual, sendo que esse comportamento tende a ser maximizado pelo crescimento da magnitude dos erros e minimizado pelo procedimento de reconciliação de dados. O

efeito que essas incertezas podem exercer sobre o projeto é essencialmente desconhecido e negligenciado.

Observando as métricas de qualidade do ajuste do modelo, vê-se na Tabela 4.14, que não houve nenhum caso de estimação por FMQP que satisfizesse o critério  $\phi$ 0  $^2$ , cujo procedimento de avaliação é explicitado no Anexo G, apesar de em alguns casos, os coeficientes de correlação serem muito bons (próximos da unidade), o que demonstra a necessidade estimar melhor as variâncias amostrais. A Tabela 4.15a, mostra a sensível melhora dos ajustes do modelo com o procedimento de reconciliação de dados. Os coeficientes de correlação para os casos com reconciliação ficam todos acima de 0,93, enquanto o caso controle com FMQP foi de apenas 0,85 (CPO Normal B). Quanto ao critério do  $\chi^2$ , os valores da função objetivo se aproximaram do limite  $^2$  máximo. Ocorreram quatro casos em que ambos os critérios do $\chi^2$  e do coeficiente de correlação foram satisfeitos.

Um fato interessante é que os coeficientes de correlação paramétrica entre os parâmetros  $k_1$  e  $k_2$  (Tabela 4.14) para todas as estimações por FMQP mostraram-se muito baixos,  $|\rho| < 0.415$ , o que evidencia que a estimação pode ser realizada de forma independente. Todavia, olhando-se para os coeficientes de correlação paramétrica encontrados por reconciliação de dados (Tabela 4.15a), nota-se que todos estiveram acima de 0.955, demonstrando uma relevante dependência entre os dois parâmetros. Esta forte correlação aparece nos casos de reconciliação por causa da inclusão da parcela  $\mathbf{G}_{\mathbf{X}}^{\mathrm{T}}\mathbf{V}_{\mathbf{X}}\mathbf{G}_{\mathbf{X}}$  no cálculo da matriz covariância paramétrica, conforme a Equação (D.8) (Anexo D). Todas as matrizes covariâncias paramétricas calculadas durante as estimações estão registradas nas tabelas do Apêndice V. Vale a pena ressaltar que a aproximação do cálculo dos intervalos de confiança normais dos parâmetros não são confiáveis e estão subestimadas, o que demonstra que se pode cometer grandes equívocos quando esse procedimento é utilizado. A rigidez imposta pela aproximação normal provoca que o intervalo de confiança inclua valores de parâmetros negativos, o que é fisicamente impossível.

As Figuras 4.12-19 mostram um padrão de contorno das fronteiras das regiões de confiança paramétrica em forma de losango e sem muita definição. Tal fato se deve ao maior número de parâmetros otimizados, de forma que a região de confiança paramétrica é um hipervolume de dimensão 12, cuja projeção sobre o plano dos parâmetros  $k_1$  e  $k_2$  produz as figuras aqui citadas. Uma possível causa da falta de definição da fronteira pode ser o número insuficiente de partículas do MEP para um

hiperespaço de 12 dimensões. Por exemplo, a existência de dois pontos combinados por direção em um hiperespaço de 12 dimensões, já resulta em  $2^{12} = 4.096$  pontos. A combinação de 3 pontos por direção lava a  $3^{12} = 531.444$  pontos, de maneira que a construção de uma malha fina em um hiperespaço de dimensão elevada não é numericamente razoável para a maior parte dos problemas práticos.

Uma proposta de métrica para comparação da amplitude das incertezas paramétricas provenientes da região de confiança paramétricas consiste em calcular a variância das coordenadas do ponto ótimo e dos pontos extremos da região de confiança projetados sobre o plano paramétrico  $k_1 \times k_2$ . O cálculo da variância com todos os pontos da região não é recomendado porque a estrutura dos dados da região de confiança não é homogênea, em função da dinâmica de busca do MEP, que resulta em alta densidade de pontos nas vizinhanças das coordenadas do ponto ótimo. Esta estrutura inviabiliza o cálculo direto da variância com todos os pontos, pois um cálculo preciso da dispersão deveria considerar de que todos os pontos da região são igualmente prováveis. Os resultados dos cálculos da variância como proposto são apresentados na forma de desvios padrões na Tabela 4.18.

Tabela 4.18: Desvios padrões a partir das coordenadas do ponto ótimo e dos pontos extremos da fronteira da região de confiança paramétrica.

Modelo Verdadeiro	Distrib. de Prob. dos	Vetor de desvios padrões	FM(	QP	Reconciliação de dados		
	Erros	adotado	$s_{k1} [h^{-1}]$	$s_{k2} [h^{-1}]$	$s_{k1} [h^{-1}]$	$s_{k2} [h^{-1}]$	
CPO	Uniforme	A	0,141	0,104	0,187	0,089	
CPO	Uniforme	В	0,416	0,229	0,662	0,224	
CPO	Normal	A	0,168	0,050	0,315	0,072	
CPO	Normal	В	0,493	4,087	0,489	0,561	
CPO	Weibull	A	0,148	0,040	0,196	0,054	
CPO	Weibull	В	0,231	0,580	0,326	0,506	
LHHW	Normal	A	0,354	0,215	0,385	0,130	
LHHW	Normal	В	0,650	1,457	1,195	0,308	

Percebe-se que a reconciliação de dados amplia a dispersão do desvio padrão do parâmetro  $k_1$  em média 43%, chegando a 84% para o caso gerado com o modelo cinético *LHHW*. Para o parâmetro  $k_2$ , na maioria dos casos, o efeito é inverso e o desvio padrão diminui em média 19%. Nos casos CPO Normal A e CPO Weibull A, os desvios padrões do parâmetro  $k_2$  aumentam 45% e 34%. Este rearranjo da dispersão dos dados promovido pela reconciliação de dados deve-se ao maior grau de liberdade proporcionado pelas dimensões adicionais a serem otimizadas, o que amplia, em termos

gerais, o número de possíveis configurações que satisfazem o mesmo valor da função objetivo, porém permitindo a estimação mais suave das perturbações dos erros das variáveis de entrada e de saída.

### 4.3.2 O emprego de um modelo equivocado

A escolha de um modelo adequado antes da etapa de estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança paramétrica constitui um passo importante para garantir a qualidade do ajuste do modelo. Uma pergunta relevante consiste em verificar se os resultados obtidos quando os dados experimentais são corrompidos com erros aleatórios normais e com erros de modelagem são distinguíveis dos resultados obtidos com a hipótese de modelo perfeito e dados corrompidos com erros normais. Para realizar tal tarefa, dados pseudoexperimentais gerados pelo modelo cinético *LHHW* com erros normais e com vetores de desvios padrões A e B foram utilizados para estimar os parâmetros em relação ao modelo de cinética de primeira ordem com parâmetros verdadeiros  $k_1 = 2,50 \text{ h}^{-1}$  e  $k_2 = 1,00 \text{ h}^{-1}$ . Os resultados obtidos estão dispostos na Tabela 4.19.

O teste *t*-Student mostrou que a hipótese de erros normais com $\mu = 0$  foi apenas rejeitada para a variável de saída  $C_A$  do conjunto de dados modelo cinético *LHHW* Normal A. No conjunto de dados modelo cinético *LHHW* Normal B, a hipótese foi rejeitada para a variável de saída  $C_B$ . Portanto, pode haver bias decorrente do equívoco na escolha do modelo ajustado nas variáveis analisadas. As análises por meio do teste  $\chi^2$  rejeitaram a hipótese de variâncias amostrais provenientes de distribuição normal com variância  $\sigma^2$  para as variâncias das variáveis de saída  $C_A$ ,  $C_B$  e  $C_C$  do caso gerados pelo modelo cinético *LHHW* Normal A. Para o caso *LHHW* Normal B, a hipótese é aceitável para todas as variáveis. As informações de ambos os testes permitem concluir que se o erro aleatório é grande o suficiente para amortecer o bias decorrente do equívoco na escolha do modelo ajustado, torna-se mais difícil identificar a polarização do modelo.

A natureza não linear do modelo faz com que o bias atue com mais intensidade em certas condições experimentais do que em outras. Analisando a Figura 4.3, fica claro que a faixa adotada pelo plano experimental  $800-1.200 \text{ kg/m}^3$  para a variável de entrada  $C_{A0}$  recai exatamente numa faixa de concentração em se que inicia um descolamento entre o comportamento da cinética de primeira ordem e o de uma reação regida pelo

modelo cinético LHHW, onde a taxa de reação é gradativamente atenuada com incrementos de maiores concentrações  $C_{A0}$ .

Tabela 4.19: Erro associado à perturbações aleatórias com desvios padrões A e B e o equívoco da escolha do modelo para ajuste.

do modelo para ajuste.								
Distribuição e vetor		Erro[Θ]	$\operatorname{Erro}[C_{A0}]$	$\operatorname{Erro}[C_A]$	$\operatorname{Erro}[C_B]$	$\operatorname{Erro}[C_C]$		
de desvios padrões	Experimento	h	$kg/m^3$	kg/m <sup>3</sup>	kg/m <sup>3</sup>	kg/m <sup>3</sup>		
utilizados								
	1	0,04	4,0	-38,7	2,2	16,5		
	2	0,02	-4,0	-37,1	8,1	36,0		
	3	-0,02	-5,0	1,0	-21,2	-10,8		
	4	0,06	13,0	-8,0	-15,5	-14,5		
LHHW_Normal_A	5	-0,02	2,0	-41,4	22,5	22,5		
	$\overline{x}$	0,02	2,00	-24,84	-0,77	9,94		
	μ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
	S	0,04	7,25	19,80	17,77	21,86		
	t	1,00	0,62	-2,81	-0,10	1,02		
	$t_4^{\alpha=0,975}$	2,78	2,78	2,78	2,78	2,78		
H <sub>0</sub> : Dist Normal		Verdadeiro	Verdadeiro	Falso	Verdadeiro	Verdadeiro		
	$\sigma^2$	0,0016	100,00	100,00	100,00	100,00		
Teste $\chi^2$	$\chi^2_{\text{Erro amostral}}$	3,200	2,100	15,679	12,625	19,121		
LHHW_Normal_A	$\chi^2_{(\upsilon=4, 0,975)}$	11,143	11,143	11,143	11,143	11,143		
	$\chi^2_{(v=4, 0,025)}$	0,484	0,484	0,484	0,484	0,484		
H <sub>0</sub> : Dist. Normal	$com s^2 = \sigma^2$	Verdadeiro	Verdadeiro	Falso	Falso	Falso		
	1	0,12	-18,0	-64,7	23,2	80,5		
	2	-0,12	13,0	-43,1	53,1	26,0		
	3	0,14	58,0	110,0	31,8	-14,8		
	4	0,11	-92,0	31,0	25,5	-14,5		
LIHIW Normal D	5	-0,01	6,7	-26,4	8,2	10,5		
LHHW_Normal_B	$\overline{x}$	0,05	-6,47	1,36	28,37	17,54		
	μ	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00		
	S	0,11	55,13	70,34	16,33	39,26		
	t	0,97	-0,26	0,04	3,88	1,00		
	$t_4^{\alpha=0,975}$	2,78	2,78	2,78	2,78	2,78		
$H_0$ : Dist Normal com $\mu = 0$		Verdadeiro	Verdadeiro	Verdadeiro	Falso	Verdadeiro		
	$\sigma^2$	0,0400	2500,00	2500,00	2500,00	2500,00		
Teste $\chi^2$	$\chi^2_{\text{Erro amostral}}$	1,227	4,863	7,917	0,427	2,466		
LHHW_Normal_B	χ <sup>2</sup> (υ=4, 0,975)	11,143	11,143	11,143	11,143	11,143		
H <sub>0</sub> : Dist. Normal of	$\chi^2_{(v=4, 0,025)}$	0,484	0,484	0,484	0,484	0,484		

O modelo *LHHW* definido pelas Equações (4.10)-(4.14) mostra que a variável de saída  $C_A$  sofre o efeito do termo de atenuação  $k'_1$  com mais intensidade nas condições  $C_{A0} = 1.200 \text{ kg/m}^3$ . O tempo de residência  $\Theta$  também exerce influência na ampli ficação dos desvios, pois permite que a mistura reacional permaneça por mais tempo no interior

do reator, acentuando o desvio de concentração encontrado. Para  $\Theta$  menores, os desvios de concentrações entre os modelos também são minimizados. Para as concentrações  $C_B$  e  $C_C$ , o efeito da atenuação da taxa de reação está relacionado à proporção  $1/(1+k_1' C_A)$ . Para condições de tempo de residência baixos, a atenuação é maior, pois a constante  $1/(1+k_1' C_A)$  diminui ( $\lim_{\Theta \to 0} C_A = C_{A0}$ ). Portanto conclui-se que os desvios entre os modelos CPO e o *LHHW* da variável de saída  $C_A$  são acentuados nas condições 1 ( $C_{A0}$  = 1.200 kg/m³;  $\Theta$  = 1,90 h) e condição 2 ( $C_{A0}$  = 800 kg/m³;  $\Theta$  = 1,90 h); enquanto os desvios das variáveis  $C_B$  e  $C_C$  são acentuados na condição 3 ( $C_{A0}$  = 1.200 kg/m³;  $\Theta$  = 0,10 h) e na condição 4 ( $C_{A0}$  = 800 kg/m³;  $\Theta$  = 0,10 h). A conclusão é confirmada pelos resultados da Tabela 4.19.

A configuração particular do modelo ajustado e dos dados pseudoexperimentais proporciona propriedades bem interessantes durante a estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança paramétrica. Dependendo do módulo e do sinal dos erros aleatórios presentes nas variáveis de entrada e de saída, e da disposição dos pontos experimentais, a estimação por FMQP pode levar a valores de parâmetros bem diferentes para um mesmo problema. A Tabela 4.14 apresenta os parâmetros ótimos do Langmuir Normal A por FMQP  $(k_1 = 2,7242 \text{ h}^{-1}; k_2 = 1,0169 \text{ h}^{-1})$  e para o caso Langmuir Normal B por FMQP ( $k_1 = 1,7590 \text{ h}^{-1}$ ;  $k_2 = 1,3340 \text{ h}^{-1}$ ). As respectivas regiões de confiança paramétricas encontram-se nas Figuras 4.10 e 4.11. As estimações por FMOP, ao ignorar os erros das variáveis de entrada, potencializam a sensibilidade dos ajustes. No caso do conjunto de dados pseudoexperimentais Langmuir Normal B, erros significativos nas variáveis  $C_{A0}$  (-18 kg/m<sup>3</sup>) e  $\Theta$  (0,12 h) podem induzir o FMQP a minimizar alguns desvios em detrimento de outros. Nota-se na Tabela 4.19 que há grandes erros para cima na variável  $C_C$ , iguais a 80,5 e 26,0 kg/m<sup>3</sup> nas condições experimentais 1 e 2, respectivamente. A FMQP deu preferência à minimização destes desvios, aumentando a constante da reação de geração do subproduto C, k2, em detrimento de  $k_1$ . A consequência desta preferência pode ser vista na Figura 4.11, em que a região de confiança paramétrica teve seu subeixo principal reorientado na direção de  $k_2$  altos, para minimizar prioritariamente os desvios de  $C_C$ .

Estimações por reconciliação de dados são menos influenciáveis pelas perturbações dos erros aleatórios. Ambos os ajustes efetuados por reconciliação de dados satisfizeram os critérios do  $\chi^2$  e do coeficiente de correlação, demonstrando a sua

robustez. As regiões de confiança paramétricas geradas por reconciliação de dados tornaram-se bem semelhantes (Figuras 4.18 e 4.19).

# 4.3.3 Influência do número de pontos experimentais e réplicas

Conforme foi discutido anteriormente na Seção 4.3.1, o número reduzido de pontos experimentais tem enorme consequências sobre as incertezas paramétricas. Em primeiro lugar, torna impossível a distinção das distribuições de probabilidades quaisquer da suposição padrão de distribuição normal. Amostras pequenas também induzem o método de estimação de parâmetros a gerarem parâmetros ótimos com bias, uma vez que a média amostral dos erros pode ficar distante de zero, apesar dos dados serem sorteados de uma população normal.

Da mesma forma, o número de réplicas exerce influência direta sobre o cálculo da variância amostral, utilizada para ponderar a significância dos desvios de cada variável. A realização de apenas três réplicas de um único ponto força a suposição de variância constante para todas as condições experimentais, fato que não pode ser nem confirmado e nem rejeitado sem a realização de mais réplicas em mais pontos experimentais. Além disso, a probabilidade de subestimar ou superestimar a variância amostral é muito grande para um grau de liberdade 2. Finalmente, o número de experimentos tem papel-chave na definição dos limites das regiões de confiança paramétricas, definidas pelas Equações (3.17) e (3.20), respectivamente, por meio do valor crítico da função *F* de Fisher.

#### 4.3.4 Comentários Finais

As análises mostram em um problema muito simples que os erros paramétricos podem apresentar comportamento complexo por causa do baixo número de graus de liberdade do problema de estimação, da natureza não linear dos modelos de processo, da magnitude dos erros experimentais e dos inevitáveis erros de modelagem. Por isso, a suposição de que a região de confiança dos parâmetros tem a forma hiperelíptica normal pode ser muito ruim e inadequada para estudos de projeto. A despeito disso, a natureza dos erros experimentais parece exercer pouca influência sobre a análise paramétrica, o que parece ser muito conveniente para o analista interessado no uso dos parâmetros para

fins de simulação. Finalmente, parece claro que o uso de procedimentos de reconciliação de dados para o tratamento dos dados experimentais pode beneficiar o processo de estimação e análise crítica das incertezas experimentais.

# 4.4 ESPECIFICAÇÃO DO PROJETO DO REATOR

Definidos os parâmetros ótimos e sua respectivas regiões de confiança paramétrica, pode-se especificar as variáveis de decisão para que se produza o máximo lucro, de acordo a Equação (4.5). As variáveis de projeto do presente problema são o volume do reator, V, e o tempo de residência,  $\Theta$ . Para executar tal tarefa foi empregado o mesmo algoritmo de otimização misto MEP/Newton da etapa de estimação de parâmetros; porém nesse caso, a função objetivo de estimação foi substituída pela Equação (4.5) com os valores especificados na Tabela 4.1, com o objetivo de encontrar o par  $\{V,\Theta\}$  que proporcionassem o máximo lucro para cada coordenada de parâmetros possíveis da região de confiança paramétrica sob avaliação. Os resultados obtidos são um conjunto de dados na forma {Lucro ótimo [milhões US\$];  $V_{\text{ótimo}}$  [m³];  $\Theta_{\text{ótimo}}$  [h];  $k_1$  [h¹]}. Portanto, verifica-se que a incerteza paramétrica resulta em dispersão e incerteza de projeto, não sendo conveniente negligenciar essa informação no processo de otimização.

As especificações de projeto para os parâmetros estimados para cada conjunto de dados pseudoexperimentais são aqui denominadas de  $Projeto\ Nominal$ . Um projeto nominal é um dos inúmeros projetos possíveis que são ótimos para um par de parâmetros  $k_1$  e  $k_2$  qualquer contido em uma dada região de confiança paramétrica. Admitindo por hipótese, no cálculo de cada projeto possível, que o par de parâmetros  $k_1$  e  $k_2$  em avaliação é o verdadeiro, obtém-se um lucro ótimo de projeto, que equivalente ao lucro real apenas se a hipótese for satisfeita. A Tabela 4.20 apresenta os resultados dos projetos e lucros nominais obtidos pelo algoritmo MEP/Newton para cada conjunto de dados analisados. Na mesma tabela encontra-se o tempo de execução demandado para calcular os projetos ótimos para todos os pares de parâmetros contidos na região de confiança paramétrica.

Tabela 4.20: Projetos e lucros nominais relativos aos parâmetros ótimos encontrados pela estimação de parâmetros, dispostos nas Tabelas 4.14 e 4.15a.

Modelo Verdadeiro	Distribuição de probabilidades do erro	Vetor de desvios padrões adotado	Tipo de estimação de parâmetro	$k_I [h^{-1}]$		V <sub>nominal</sub> [m <sup>3</sup> ]	$\Theta_{ m nominal}$ [h]	Lucro nominal [milhões US\$]	Tempo de execução <sup>†</sup> [min]
CPO	Condição	Isenta de	erros	2,5000	1,0000	4,23	0,283	357,77	
CPO	Uniforme	A	<b>FMQP</b>	2,6328	0,9905	4,57	0,269	418,24	16,5
CPO	Uniforme	A	Reconc	2,4755	0,9956	4,18	0,286	349,10	5,0
CPO	Uniforme	В	<b>FMQP</b>	1,6675	0,9643	2,31	0,420	107,09	31,5
CPO	Uniforme	В	Reconc	2,0831	0,9645	3,29	0,338	216,02	27,0
CPO	Normal	A	<b>FMQP</b>	2,5095	0,9817	4,29	0,282	367,59	
CPO	Normal	A	Reconc	2,6186	0,9718	4,57	0,271	418,47	30,1
CPO	Normal	В	<b>FMQP</b>	1,5899	1,1218	1,91	0,442	73,01	56,7
CPO	Normal	В	Reconc	2,3777	1,0735	3,80	0,296	288,73	40,0
CPO	Weibull	C	<b>FMQP</b>	2,3906	0,9995	3,96	0,295	314,30	13,7
CPO	Weibull	C	Reconc	2,3748	0,9835	3,96	0,297	312,89	33,5
CPO	Weibull	D	<b>FMQP</b>	1,1946	0,7805	1,52	0,587	46,42	41,8
CPO	Weibull	D	Reconc	1,3606	0,7582	1,93	0,515	74,73	28,5
LHHW	Normal	A	<b>FMQP</b>	2,7242	1,0169	4,75	0,260	450,73	32,0
LHHW	Normal	A	Reconc	3,1954	1,0208	5,91	0,224	698,86	18,5
LHHW	Normal	В	<b>FMQP</b>	1,7590	1,3340	1,99	0,401	79,15	49,8
LHHW	Normal	В	Reconc	3,4146	1,0671	6,37	0,210	810,46	28,1

<sup>†</sup> Tempo de execução para todas as combinações paramétricas na região de confiança.

A Tabela 4.20 demonstra a enorme influência que as incertezas paramétricas podem causar na especificação de um projeto e sobre a expectativa de lucro da operação. O lucro nominal para o dados provenientes do modelo CPO apresentam uma variabilidade entre US\$ 42 a 418 milhões. Como é esperado, o lucro é fortemente relacionado com o parâmetro  $k_1$ . Altos valores de  $k_1$  denotam maior rendimento de geração do produto desejado B, viabilizando o projeto de reatores maiores com tempos de residência menores, o que permite maximizar o lucro. Os parâmetros ótimos dos casos "CPO Uniforme A FMQP" e "CPO Normal A com reconciliação de dados" com  $k_1$  iguais a 2,63 h<sup>-1</sup> e 2,62 h<sup>-1</sup>, respectivamente, proporcionam um retorno de US\$ 418 milhões, enquanto que o caso verdadeiro, com  $k_1 = 2,50 \text{ h}^{-1}$  e  $k_2 = 1,00 \text{ h}^{-1}$  gera um lucro de US\$ 357,8 milhões. O aumento do parâmetro  $k_2$  tende a diminuir a seletividade do produto B devido à maior geração do subproduto C, o que acarreta a indicação de volume de reatores menores, juntamente com tempo de residência maiores. O tempo de execução do algoritmo de otimização MEP/Newton é bem considerável em virtude do elevado número de pares de parâmetros que integram a região de confiança paramétrica geral de cada caso.

As Figuras 4.22 a 4.25 demonstram o comportamento da função lucro, expressa pela Equação (4.5), em relação ao volume e o tempo de residência do reator, dados os

parâmetros cinéticos das duas reações em série. As Figuras 4.22 e 4.23 apresentam a função lucro considerando  $k_1 = 2,50 \text{ h}^{-1}$  e  $k_2 = 1,00 \text{ h}^{-1}$ . Note na Figura 4.23 que a região de lucro máximo estende-se ao longo de uma ampla faixa de volume de reatores [3,0; 5,0] m³ e uma estreita faixa de tempos de residência [0,27; 0,32] h. As condições de projeto que provocam grandes prejuízos são os tempos de residência pequenos, independentemente do volume de reator considerado. A mistura reacional não tem tempo suficiente para reagir completamente quando o tempo de residência é baixo. Todavia, à medida que o tempo de residência aumenta, o rendimento do produto desejado B cai, reduzindo o lucro.

Para condições de parâmetros cinéticos mais desfavoráveis ( $k_1 < k_2$ ), tal como mostrado nas Figuras 4.24 e 4.25, a rentabilidade do projeto é menor, dado que a seletividade das reações é pior. Nesse caso, volumes de reatores pequenos associados com tempos de residência maiores são mais atrativos, uma vez que isso permite minimizar o investimento inicial de compra do reator e a operação com longos tempo de residência gera redução de gastos resultantes da aquisição de matéria-prima A. Observe na Figura 4.25 que as configurações de projeto de baixo tempo de residência geram prejuízo e estão deslocadas na direção de volumes de reator maiores. O volume máximo é restrito a 1,7 m³ para tempos de residência entre 0,4 e 0,7 h.

Os resultados de projetos ótimos para cada conjunto de dados experimentais e respectivas regiões de confiança paramétrica geram uma superfície tridimensional na forma do grupamento {Lucro ótimo [milhões US\$];  $V_{\text{ótimo}}$  [m³];  $\Theta_{\text{ótimo}}$  [h]}, conforme ilustrado na Figura 4.26 para o caso "CPO Uniforme A FMQP". Para facilitar a visualização dos resultados mencionados, são apresentados as projeções da superfície tridimensional nos planos  $\Theta$  x V e V x Lucroótimo. As Figuras 4.27 e 4.28 ilustram as projeções nos dois planos da Figura 4.26.

Para o cálculo dos projetos ótimos, foram admitidas as seguintes restrições durante o cálculo dos projetos ótimos:

- Volume mínimo admissível do reator: 0,1 m<sup>3</sup>;
- Tempo de residência máximo admissível: 10 h;

As Figuras 4.26 a 4.57 apresentam os projetos ótimos para cada uma das condições experimentais deste trabalho.

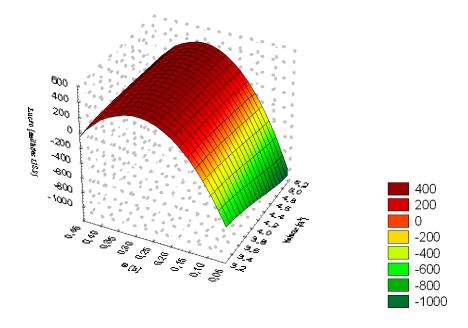


Figura 4-22: Comportamento da função lucro em função de  $\Theta$  e V para os parâmetros cinéticos  $k_1$  = 2,50  $h^{-1}$  e  $k_2$  = 1,00  $h^{-1}$ .

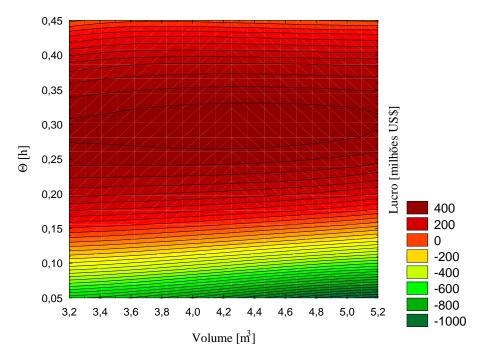


Figura 4-23: Curvas de nível da função lucro em função de  $\Theta$  e V para os parâmetros cinéticos  $k_1$  = 2,50  $h^{-1}$  e  $k_2$  = 1,00  $h^{-1}$ .

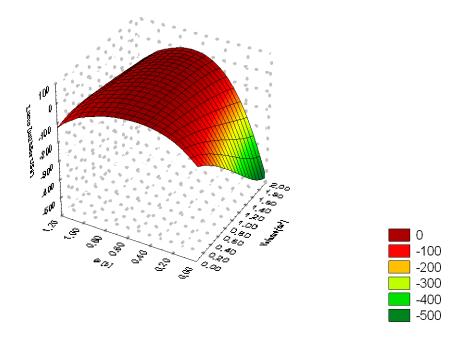


Figura 4-24: Comportamento da função lucro em função de  $\Theta$  e V para os parâmetros cinéticos  $k_1=1,6946~h^{-1}$  e  $k_2=2,2671~h^{-1}$ .

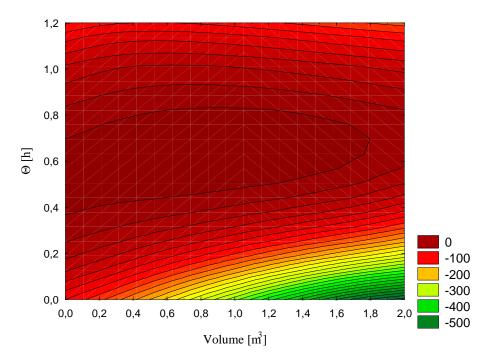


Figura 4-25: Curvas de nível da função lucro em função de  $\Theta$  e V para os parâmetros cinéticos  $k_1 = 1,6946 \ h^{-1}$  e  $k_2 = 2,2671 \ h^{-1}$ .

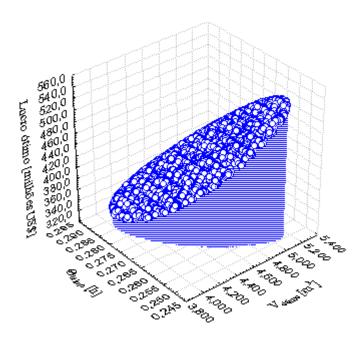


Figura 4-26: Especificações de V,Θ e Lucro para projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP.

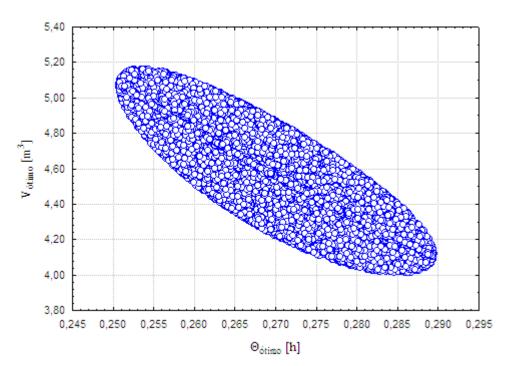


Figura 4-27: Gráfico Θ versus V dos Projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP.

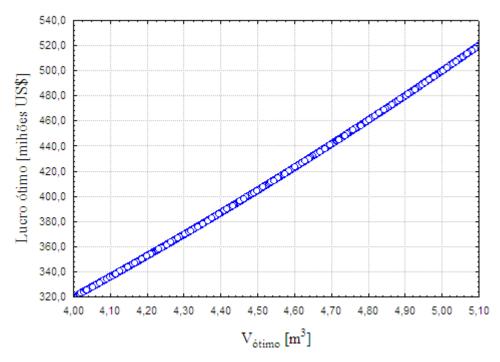


Figura 4-28: Gráfico V versus lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP.

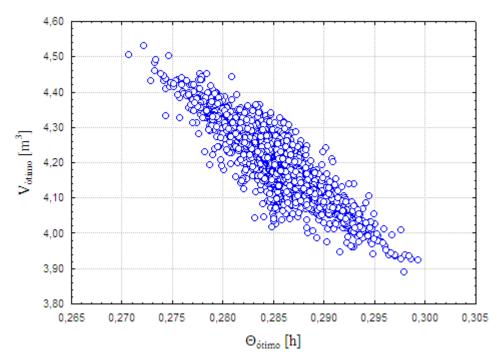


Figura 4-29: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

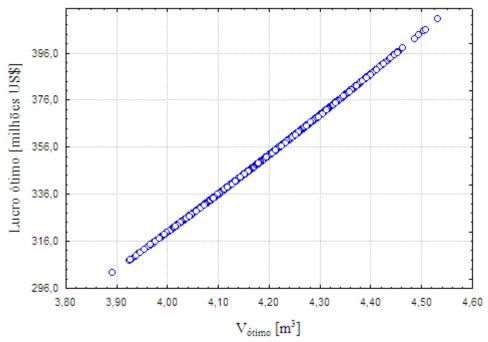


Figura 4-30: Gráfico V versus lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

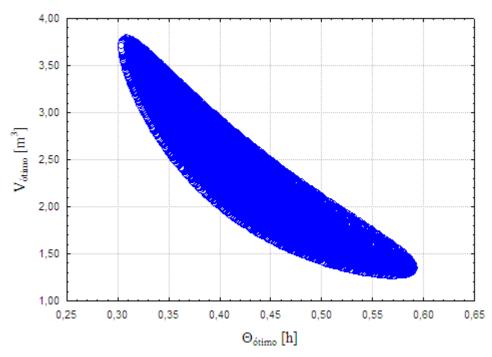


Figura 4-31: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP.

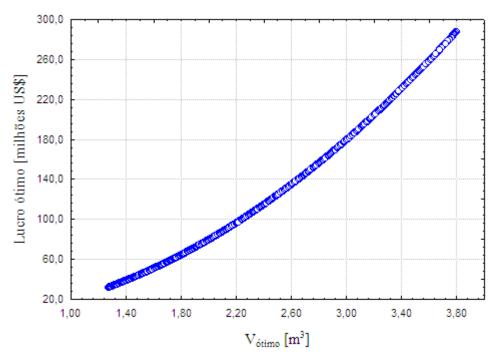


Figura 4-32: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP.

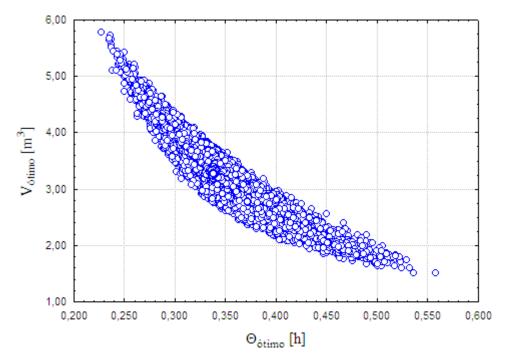


Figura 4-33: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

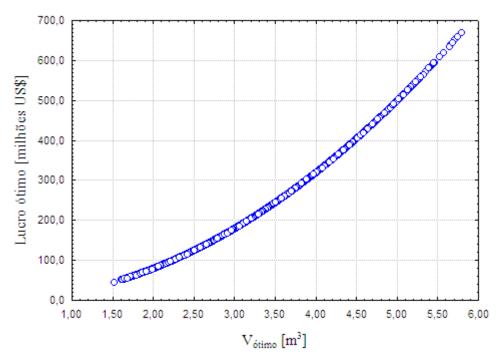


Figura 4-34: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Uniforme, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

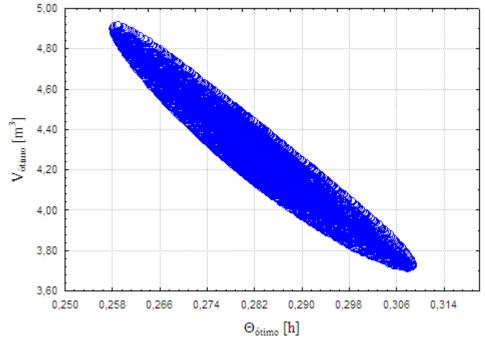


Figura 4-35: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP.

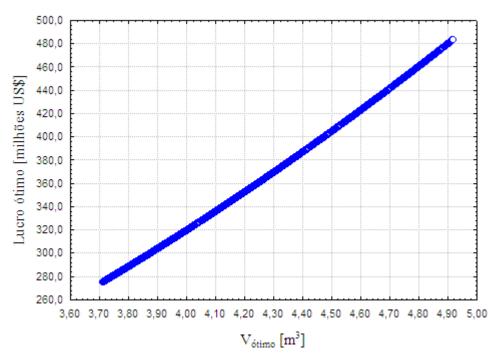


Figura 4-36: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP.

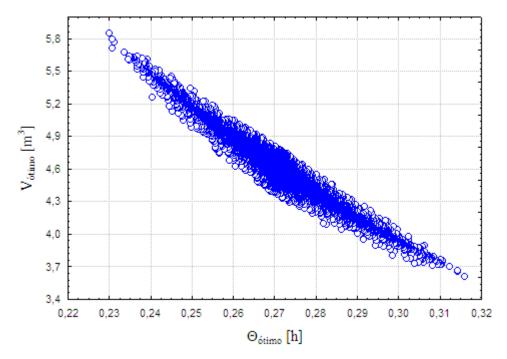


Figura 4-37: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica geral do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

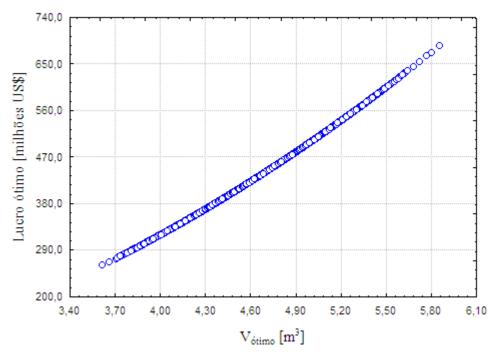


Figura 4-38: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

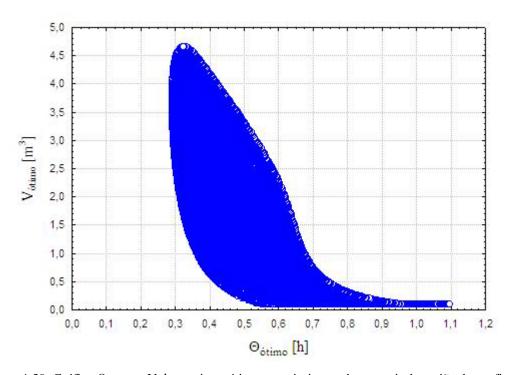


Figura 4-39: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP.

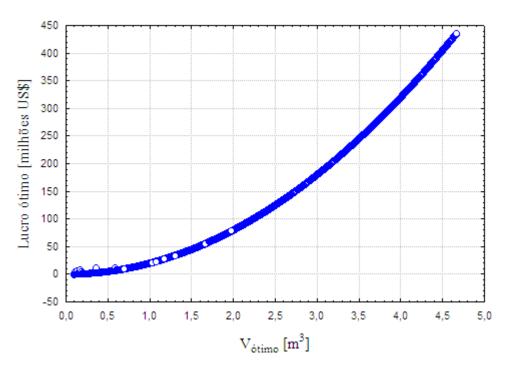


Figura 4-40: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP.

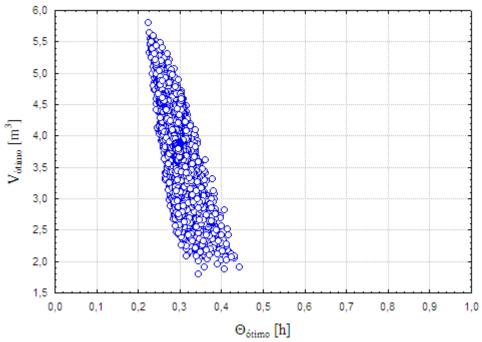


Figura 4-41: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

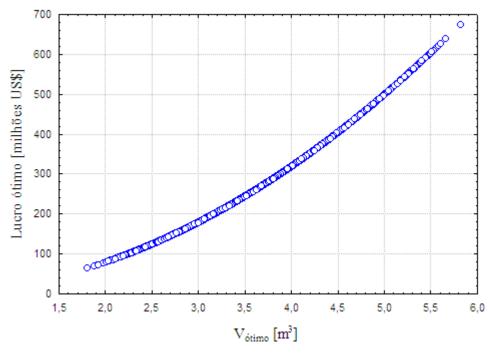


Figura 4-42: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

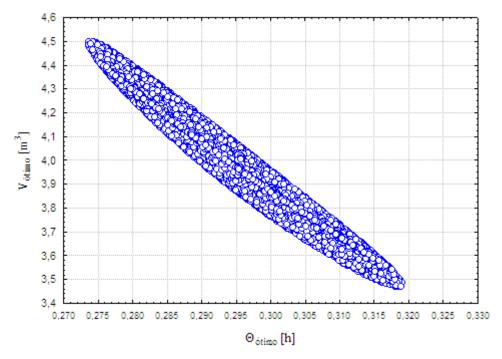


Figura 4-43: Gráfico  $\Theta$  versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FQMP.

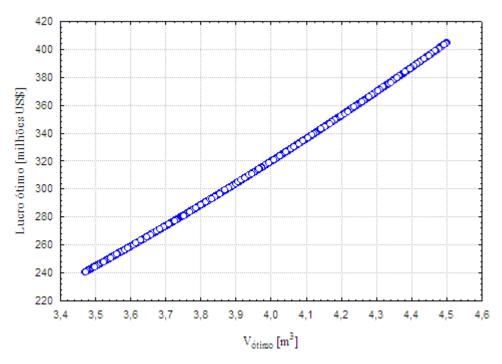


Figura 4-44: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP.

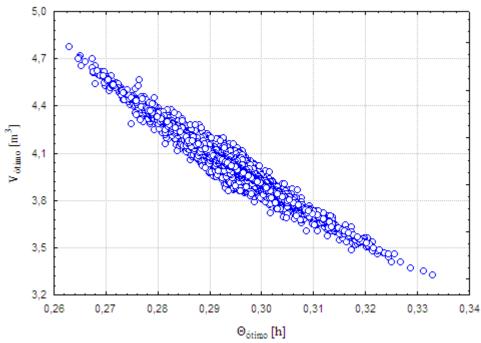


Figura 4-45: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvio padrão C e estimação de parâmetros por Reconciliação de dados.

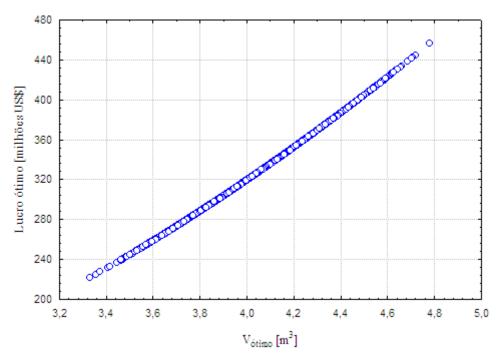


Figura 4-46: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

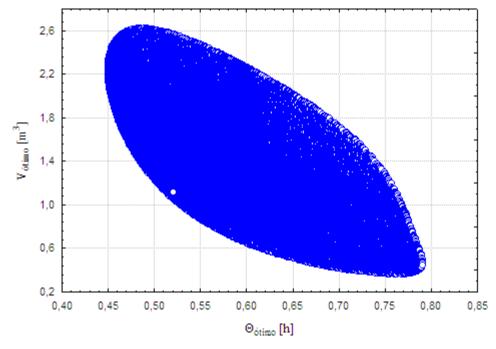


Figura 4-47: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP.

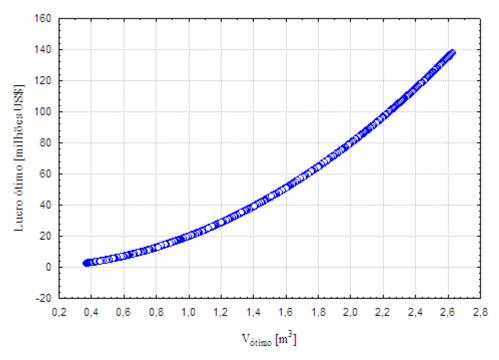


Figura 4-48: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP.

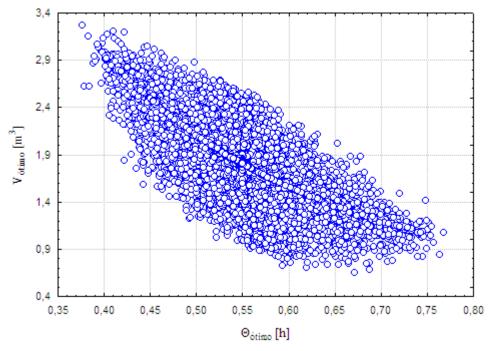


Figura 4-49: Gráfico Θ versus V dos Projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

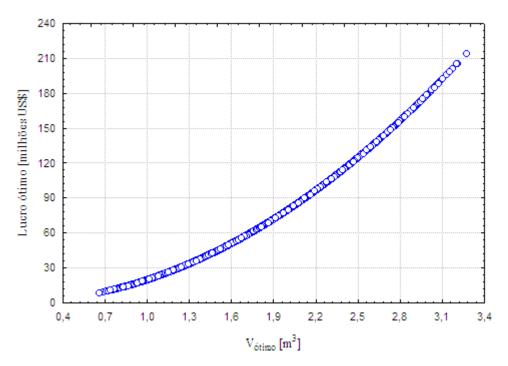


Figura 4-50: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso CPO Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

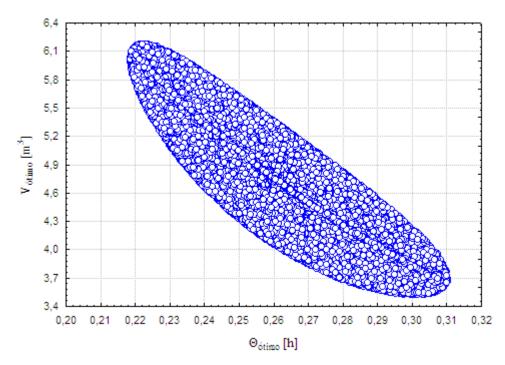


Figura 4-51: Gráfico  $\Theta$  versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP.

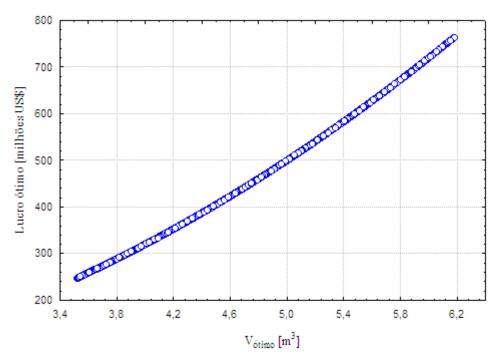


Figura 4-52: Gráfico V versus Lucro dos Projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP.

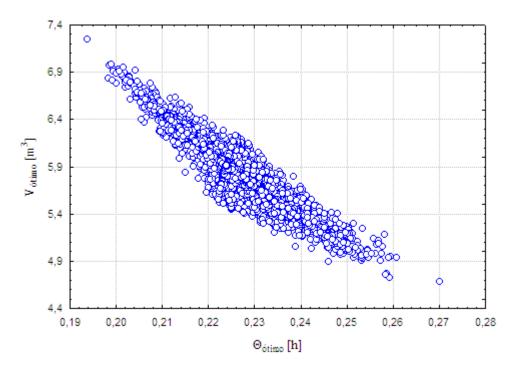


Figura 4-53: Gráfico Θ versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

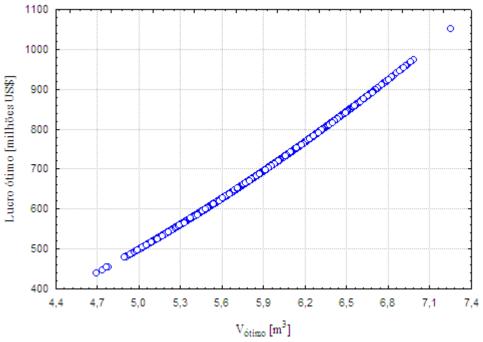
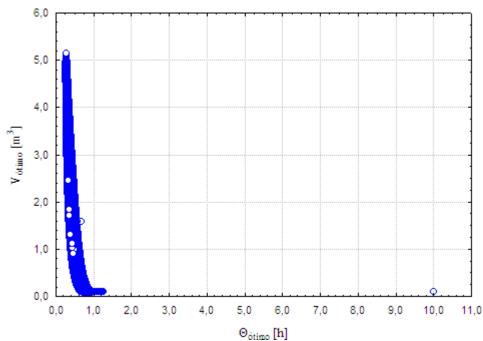


Figura 4-54: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.



 $\Theta_{\text{ótimo}}$  [h] Figura 4-55: Gráfico  $\Theta$  versus V dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP.

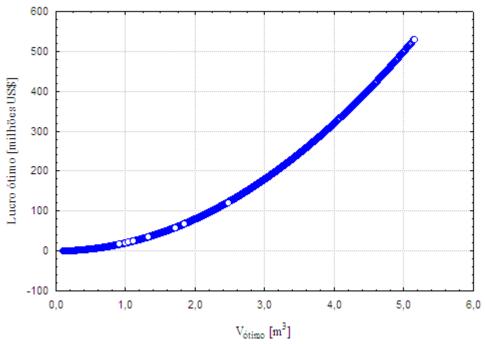


Figura 4-56: Gráfico V versus Lucro dos Projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP.

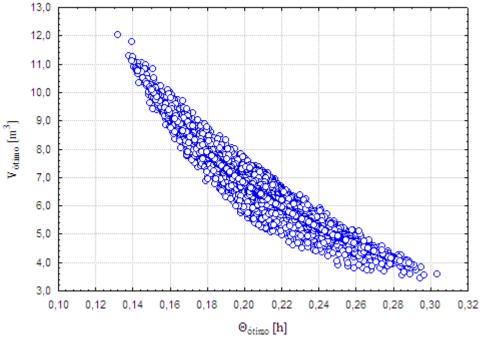


Figura 4-57: Gráfico Θ versus V dos Projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

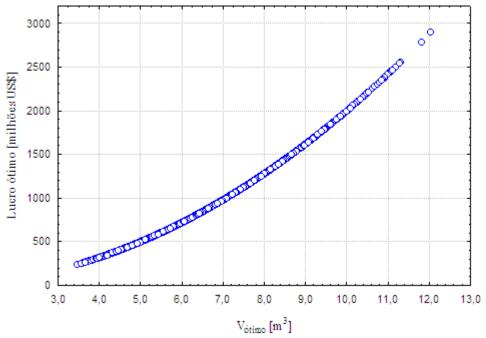


Figura 4-58: Gráfico V versus Lucro dos projetos ótimos possíveis gerados a partir da região de confiança paramétrica do caso LHHW Normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados.

As Figuras 4.26 a 4.58 mostram que tanto as condições de projeto quanto os lucros esperados são fortemente dependentes dos parâmetros estimados e das condições de estimação. Portanto, pode-se considerar temeroso que a informação decorrente do processo de estimação de parâmetros seja desprezada na fase de projeto. Ainda mais interessante, as regiões de confiança do projeto são freqüentemente não elípticas e complexas, como as regiões paramétricas que as originaram.

Percebe-se pelas Figuras 4.26 a 4.58, que os projetos ótimos representam uma superfície, dado que para cada par de valores de parâmetros cinéticos há um par de variáveis de projeto que maximiza o lucro. A configuração de projeto ótimo é definida analíticamente por:

$$\nabla L(\mathbf{V}^*, \mathbf{\Theta}^*) = 0 \tag{4.31}$$

onde  $V^*$  e  $\Theta^*$  são as variáveis de projeto ótimo. Para a função lucro do presente estudo, tem-se:

$$\frac{\partial L}{\partial V} = \left[C_B U S \$B + C_C U S \$C - C_{A0} U S \$A - U S \$Q\right] \frac{\Delta t}{\Theta} - 2.U S \$V \cdot V = 0 \tag{4.32}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \Theta} = -\left[C_B U S \$B + C_C U S \$C - C_{A0} U S \$A - U S \$Q\right] \frac{V \cdot \Delta t}{\Theta^2} + \\
-\left[\frac{\partial C_B}{\partial \Theta} U S \$B + \frac{\partial C_C}{\partial \Theta} U S \$C\right] \cdot \frac{V \cdot \Delta t}{\Theta} = 0$$
(4.33)

Substituindo (4.32) e (4.33) em (4.5):

$$L(V^*, \Theta^*) = \begin{cases} US\$B \left[ \frac{\partial C_B}{\partial \Theta} - \frac{C_B}{2\Theta^*} \right] + US\$C \left[ \frac{\partial C_C}{\partial \Theta} - \frac{C_C}{2\Theta^*} \right] + \\ -\frac{C_{A0}US\$A}{2\Theta^*} - \frac{US\$Q}{2\Theta^*} \end{cases}$$
(4.34)

Nota-se que na Equação (4.34), a função lucro ótimo é linearmente proporcional ao volume do reator. Tal peculiaridade faz com que as linhas de nível de isolucro sejam paralelas ao plano e possibilita que as superfícies de projeto ótimo sejam paralelas aos planos  $V \times \Theta$ , como pode ser observado nas Figuras 4.26 a 4.58.

Percebe-se também pelas Figuras 4.28, 4.30, 4.36, 4.44, 4.46 que a relação entre o lucro ótimo e o volume do reator é praticamente linear para  $V>3\,\,\mathrm{m}^3$  e quando apresentado em faixas estreitas. Para  $V<3\,\,\mathrm{m}^3$  ou para amplas faixas de volume do reator, tal como apresentada na Figura 4.56, a forma da curva é de uma parábola. O fato se deve à maior contribuição do termo com derivadas primeiras das concentrações de produto B e do subproduto C em relação ao tempo de residência  $\Theta$  da Equação (4.34), em condições de volume pequenos ( $V<3\,\mathrm{m}^3$ ).

Os projetos ótimos representam a configuração das variáveis de projeto que maximizam a função lucro, admitindo como hipótese que os valores dos parâmetros cinéticos adotados no projeto são exatamente os valores verdadeiros para o fenômeno modelado. Cada projeto ótimo pode proporcionar lucros esperados próximos do resultado ótimo se os parâmetros cinéticos reais forem próximos dos valores de projeto. Dependendo se o projeto é sub ou superdimensionado, o lucro realizado pode ser menor ou maior do que o lucro nominal ótimo de projeto. As Figuras 4.59 a 4.74 apresentam a região de confiança de lucro esperado para cada conjunto experimental e estimação de parâmetros estabelecidos anteriormente.

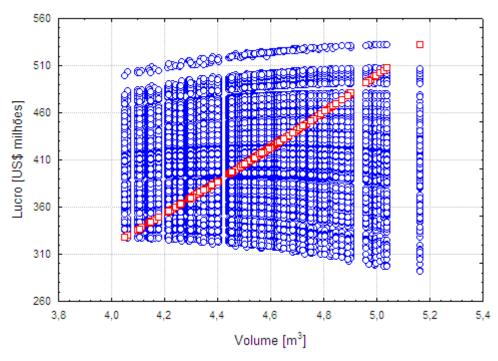


Figura 4-59: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possiveis da referida região de confiança paramétrica.

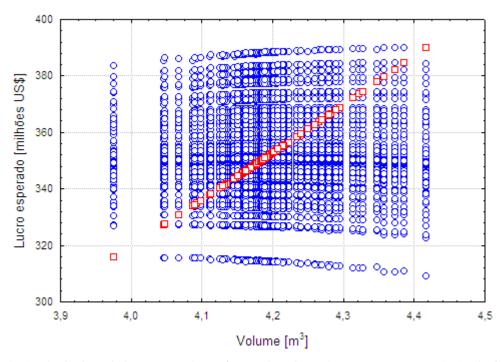


Figura 4-60: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possiveis da referida região de confiança paramétrica.

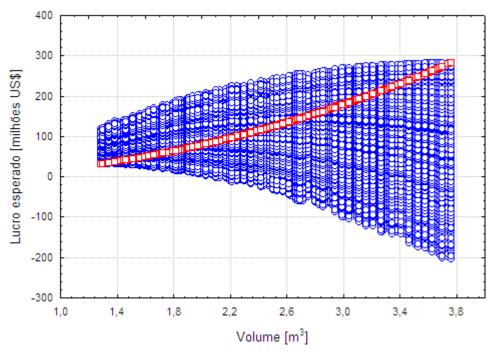


Figura 4-61: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição uniforme, vetor de desvio padrão B e estimação de parâmetros por FMQP. A curva ( $\square$ ) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

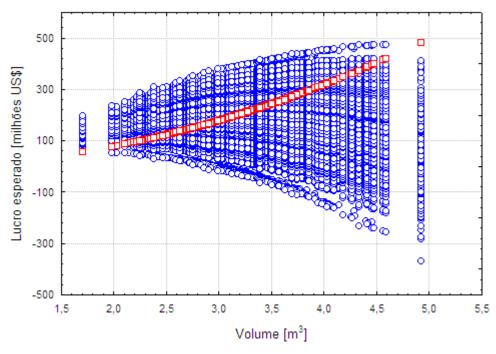


Figura 4-62: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados. A curva (

representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

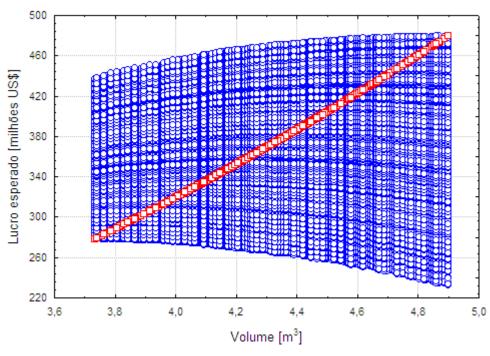


Figura 4-63: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP. A curva (□) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

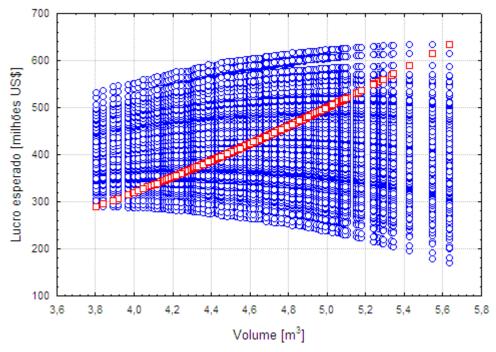


Figura 4-64: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados. A curva (

representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

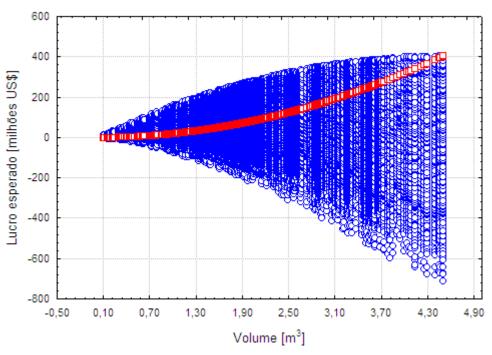


Figura 4-65: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP. A curva (

) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica

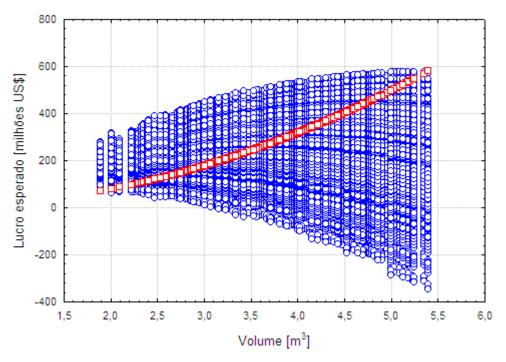


Figura 4-66: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados. A curva (

representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica

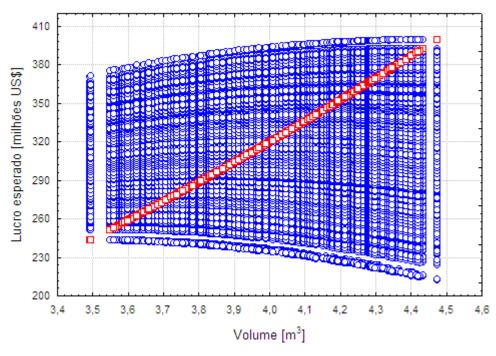


Figura 4-67: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP. A curva (
) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica

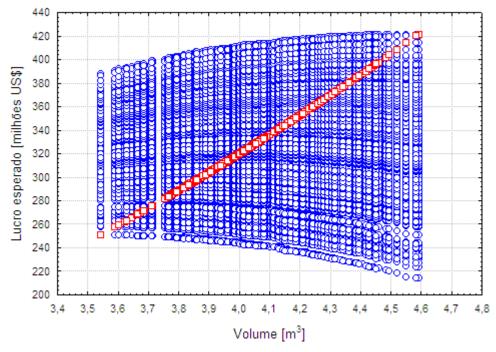


Figura 4-68: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados. A curva (

| representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

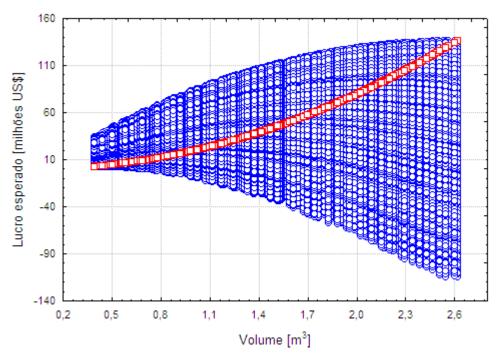


Figura 4-69: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP. A curva (
) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

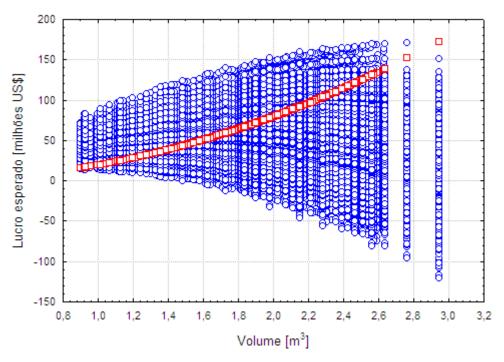


Figura 4-70: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados. A curva (

| representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

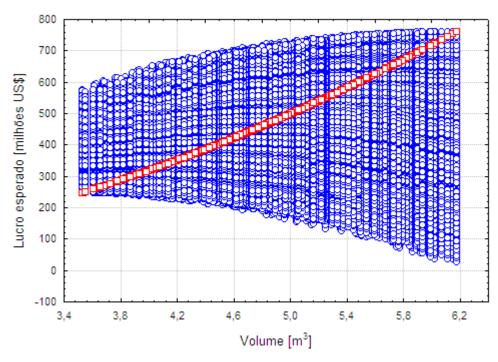


Figura 4-71: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso LHHW, distribuição normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP. A curva (

representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

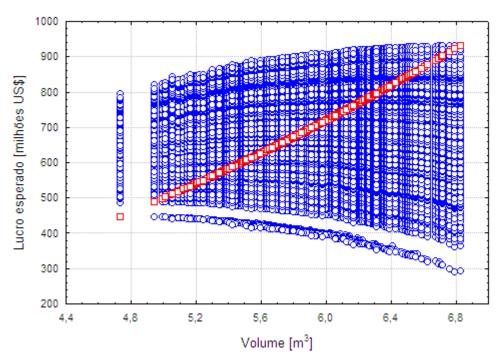


Figura 4-72: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso LHHW, distribuição normal, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por reconciliação de dados. A curva (

) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

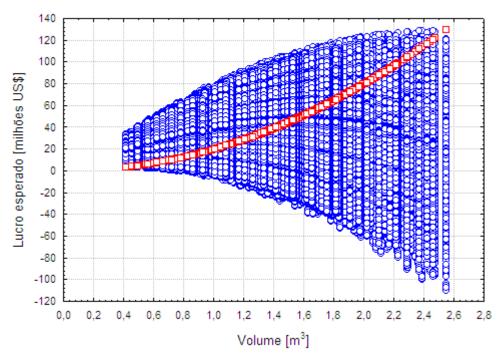


Figura 4-73: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso LHHW, distribuição normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por FMQP. A curva (

representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

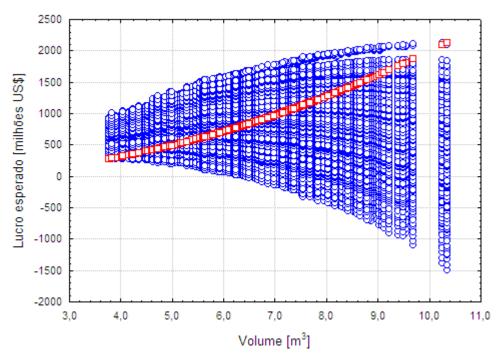


Figura 4-74: Distribuição de lucro esperado em função do volume do reator para o caso LHHW, distribuição normal, vetor de desvios padrões B e estimação de parâmetros por reconciliação de dados. A curva (

) representa os projetos ótimos para todas configurações possíveis da referida região de confiança paramétrica.

As Figuras 4.59 a 4.74 foram geradas admitindo-se para cada condição de projeto ótimo  $\{V^*, \Theta^*\}$  que os parâmetros poderiam varia r como descrito na região de confiança paramétrica. Nesse sentido, as Figuras 4.59 a 4.74 não apresentam projetos ótimos, mas as flutuações esperadas nos lucros em decorrência das incertezas paramétricas. Portanto, essas figuras apresentam as incertezas reais decorrentes da realização do projeto, uma vez que o parâmetro  $\alpha^*$  pode ser usado para o projeto, quando o parâmetro real é  $\alpha^* + \Delta \alpha^*$ .

Nota-se que quanto mais ampla é a região de confiança paramétrica, maior é a incerteza sobre quais são os valores verdadeiros dos parâmetros cinéticos. Consequentemente, a variabilidade do lucro esperado para um determinado projeto também é maior, sendo possíveis lucros maiores do que o nominal, lucros menores do que o nominal e até mesmo prejuízo, como pode ser observado nas Figuras 4.61, 4.62, 4.65, 4.66, 4.69, 4.70, 4.73 e 4.74.

Percebe-se nas Figuras 4.59, 4.60, 4.63, 4.66 a 4.68, 4.71 e 4.72 que os volumes de projeto do reator estão compreendidos entre 2 e 6 m³, fato que comprova a importância da consideração dos erros paramétricos e o procedimento aqui proposto para delimitação das regiões de confiança. Para os casos em que a região de confiança é derivada de incertezas com desvio padrão mais alto, representado pelo vetor de desvios padrões B, foram verificados volumes abaixo de 2 m³, conforme pode ser visto nas Figuras 4.61 e 4.62 (caso CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões B), 4.65 e 4.66 (caso CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões B) e 4.69-4.70 (caso CPO, distribuição de Weibull, vetor de desvios padrões B).

Diante da ampla variedade de possíveis soluções ótimas para os volumes de projeto do reator e dos tempos de residência, o projetista é impelido a adotar critérios adicionais para a escolha da melhor configuração de projeto, dado que todos os pontos no interior da região de confiança paramétrica e de lucro esperado são igualmente factíveis e não há motivos que possam ser levantados durante a realização de experimentos, estimação de parâmetros e delimitação da região de confiança paramétrica que justifiquem preterir um par de parâmetros cinéticos dentro da região de confiança em relação aos outros. Este critério de seleção da condição de projeto é externo ao problema e baseia-se na tomada de decisão do projetista do que este considera como fator mais relevante em sua avaliação pessoal.

O critério tacitamente escolhido em todos os casos em que não se avalia a influência dos erros sobre o projeto consiste em simplesmente ignorá-los e adotar o

conjunto de parâmetros ótimos obtidos pelo procedimento de estimação de parâmetros, o que representa a escolha da condição nominal como condição de projeto. Esta é a escolha mais intuitiva, porém ela não avalia o risco de prejuízo ou perda de oportunidade, caso a condição operacional verdadeira seja muito diferente da condição de projeto. O aspecto que considera que o projeto deve dispor de um bom desempenho, independentemente de que as condições verdadeiras sejam muito diferentes daquelas consideradas no projeto, pode ser definido pelas grandezas robustez e oportunidade, conforme discutido na Seção 2.5 do Capítulo 2.

Um critério bastante adotado na literatura é o *max-min*, que seleciona o melhor desempenho na pior condição possível. Este critério tem como estratégia garantir a robustez máxima do projeto, de forma que todos os lucros ótimos possíveis sejam maiores do que aquele obtido na condição nominal de projeto. Como foi discutido na Seção 2.5, existe também o antagônico critério *min-max* arrependimento, pelo qual busca-se a mínima possibilidade de arrependimento na melhor condição possível.

Estes dois critérios antagônicos indicam uma abordagem com viés pessimista, por meio da adoção de um reator de pequeno volume (menor investimento de capital), ou uma abordagem otimista, com reatores maiores em função do risco inerente do processo em estudo. Conforme discutido na Seção 1.1 do Capítulo 1, risco consiste na pior potencial conseqüência advinda da tomada de decisão, que no presente caso corresponderia à escolha de uma configuração de projeto. Comparando-se as Figuras 4.64 e 4.66, nota-se que a curva inferior que delimita a região de confiança do lucro esperado da Figura 4.66 apresenta derivada mais negativa do que a da curva da Figura 4.64, para um mesmo volume de reator. As referidas curvas inferiores são uma representação gráfica do conceito de risco do projeto, de forma que se pode afirmar que o risco de projeto da Figura 4.66 é bem maior do que a da Figura 4.64, visto que as incertezas paramétricas são maiores e o potencial de prejuízo é também maior naquela situação.

Os resultados do projeto obtidos pelo algoritmo de busca dos projetos segundo o critério *max-min* ou de robustez máxima (Apêndice II) podem ser visto na Tabela 4.21. Observa-se que quanto maior a incerteza acerca dos parâmetros, a adoção do critério *max-min* leva a um projeto bastante conservativo. Em alguns casos, como por exemplo, no caso modelo CPO, distribuição normal, vetor de desvios padrões B, estimação de parâmetros por FMQP, o volume mínimo do reator foi de 0,1 m³, dado que a região de

confiança paramétrica era bem ampla e permitia condições de parâmetros cinéticos bem desfavoráveis para o projeto.

Tabela 4.21: Projetos encontrados de acordo o critério MAX MIN Lucro, que representa a condição de robustez máxima.

Modelo	Distribuição de probabilidades	Estimação de parâmetro	Vetor de desvios padrões	Volume do reator [m³]	Tempo de residência [h]	Lucro mínimo esperado [US\$ milhões]
CPO	Uniforme	FMQP	A	4,01	0,286	321,948
CPO	Uniforme	Reconciliação	A	3,89	0,298	302,777
CPO	Uniforme	FMQP	В	1,27	0,570	32,264
CPO	Uniforme	Reconciliação	В	1,51	0,536	45,801
CPO	Normal	FMQP	A	3,71	0,308	275,530
CPO	Normal	Reconciliação	A	3,61	0,316	261,019
CPO	Normal	FMQP	В	0,10	0,994	-0,597
CPO	Normal	Reconciliação	В	1,80	0,345	65,138
CPO	Weibull	FMQP	A	3,47	0,319	240,720
CPO	Weibull	Reconciliação	A	3,33	0,333	221,852
CPO	Weibull	FMQP	В	0,37	0,754	2,696
CPO	Weibull	Reconciliação	В	0,66	0,671	8,689
LHHW	Normal	FMQP	A	3,52	0,300	248,212
LHHW	Normal	Reconciliação	A	4,69	0,270	439,375
LHHW	Normal	FMQP	В	0,10	10,000	-0,348
LHHW	Normal	Reconciliação	В	3,47	0,294	240,780

Comparando-se os parâmetros de projeto volume do reator e tempo de residência pelo critério de robustez máxima da Tabela 4.21 com os projetos nominais apresentados na Tabela 4.20, verifica-se que os lucros com robustez máxima são sempre menores do que os lucros nominais. Entretanto, para os projetos da Tabela 4.21, o critério *max-min* garante com 95% de confiança que o lucro será sempre maior do que o explicitado na hipótese dos valores dos parâmetros cinéticos verdadeiros serem diferentes dos parâmetros cinéticos usados para definir o projeto de robustez máxima.

Os projetos nominais, apesar do lucro nominal mais convidativo, estão sujeitos ao risco de terem desempenho pior do que o projeto, segundo o critério de robustez máxima, como pode ser comprovado na Figura 4.61. Nesta figura, é apresentado o lucro esperado para o caso do modelo CPO, distribuição uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões B, cujas variáveis de projetos nominais e o de robustez máxima são {2,31 m³; 0,42 h} com lucro nominal de US\$ 107,09 milhões (Tabela 4.20) e {1,27 m3; 0,57 h} com lucro mínimo esperado de US\$ 32,26 milhões (Tabela 4.21), respectivamente. Na Figura 4.61, percebe-se que o lucro mínimo

esperado para o projeto nominal é aproximadamente US\$ -20 milhões; ou seja, muito pior do que o projeto com robustez máxima. Por meio do critério *max-min*, o projetista, diante de incertezas severas associadas com alto risco, deve se comportar da forma mais cautelosa possível, independente da possibilidade de lucros muito maiores, caso o analista se arriscar mais.

Para problemas de dimensionamento sujeitos a incertezas severas, é interessante avaliar a possibilidade de assumir riscos maiores, dada a falta de informação. Conforme proposto na Seção 3.8 do Capítulo 3, empregou-se o algoritmo de cálculo de robustez e oportunidade em função do nível de recompensa crítica (Apêndice III) para estabelecer o *trade off* entre estas duas grandezas. Os resultados para o ajuste do modelo CPO, distribuição uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões A encontram-se na Tabela 4.22 e para o ajuste modelo CPO, distribuição uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões B é apresentado na Tabela 4.23.

Tabela 4.22: Robustez e Oportunidade em função dos níveis de recompensa crítica  $R_c$  e recompensa dos sonhos  $R_w$  e seus respectivos projetos para o problema de ajusto do modelo CPO, distribuição de probalidades uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões A.

R <sub>c</sub> [US\$ milhões]	R <sub>w</sub> [US\$ milhões]	Volume [m <sup>3</sup> ]	Tempo de residência [h]	$\begin{array}{c} Robustez \\ \alpha \end{array}$	Oportunidade β
321,9	500,0	4,01	0,286	0,918	0,704
322,0	500,0	4,08	0,289	0,918	0,693
327,0	500,0	4,08	0,289	0,918	0,693
332,0	500,0	4,08	0,289	0,918	0,693
337,0	500,0	4,10	0,281	0,583	0,660

Tabela 4.23: Robustez e Oportunidade em função dos níveis de recompensa crítica  $R_c$  e recompensa dos sonhos  $R_w$  e seus respectivos projetos para o problema de ajusto do modelo CPO, distribuição de probalidades uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões B.

R <sub>c</sub> [US\$ milhões]	R <sub>w</sub> [US\$ milhões]	Volume [m <sup>3</sup> ]	Tempo de residência [h]	Robustez $\alpha$	Oportunidade β
32,3	100,0	1,27	0,570	0,545	0,279
33,0	100,0	1,27	0,541	0,539	0,239
35,0	100,0	1,32	0,535	0,517	0,200
37,0	100,0	1,36	0,529	0,496	0,173
39,0	100,0	1,40	0,523	0,475	0,150
41,0	100,0	1,27	0,516	0,450	0,209
43,0	100,0	1,47	0,512	0,436	0,110

Os valores de  $R_c$  mostrados na Tabela 4.22, foram escolhidos na faixa de US\$ 321,9-337,0 milhões devido observação da Figura 4.59 onde se pode ver que o valor de

US\$ 321,9 milhões representa o ponto de robustez máxima (ponto situado no vértice inferior do lado esquerdo da região de lucro esperado) e os outros valores de  $R_c$  são valores igualmente espaçados imediatamente maiores do que o primeiro ponto. Foi arbitrado o valor  $R_w$  = US\$ 500,0 milhões, na Tabela 4.22, devido ser um número entre a fronteira superior da curva de lucro esperado e o lucro nominal da Figura 4.59, que são US\$ 510,0 e US\$ 418,2 milhões, respectivamente.

De forma análoga, os valores de  $R_c$  mostrados na Tabela 4.23, foram escolhidos na faixa de US\$ 32,3-43,0 milhões devido observação da Figura 4.61 onde se pode ver que o valor de US\$ 32,3 milhões representa o ponto de robustez máxima, enquanto que os outros valores de  $R_c$  são valores igualmente espaçados imediatamente maiores do que este ponto. Foi arbitrado o valor  $R_w$  = US\$ 100,0 milhões, na Tabela 4.23, devido ser um número abaixo da fronteira superior da curva de lucro esperado e do lucro nominal da Figura 4.58, que são US\$ 300,0 e US\$ 107,1 milhões, respectivamente.

Como foi discutido na Seção 2.5 do Capítulo 2, quanto maior a grandeza robustez, melhor; e quanto menor a grandeza oportunidade, melhor. Vê-se na Tabela 4.22, que para níveis de recompensa crítica crescentes, a redução do fator de oportunidade β é muito pequena (de 0,704 para 0,693), exceto para o último nível de recompensa de US\$ 337 milhões, quando se observa uma queda abrupta do fator de robustez α de 0,918 para 0,583. Tal fato demonstra que a flexibilização da robustez e do risco com a aposta de um volume reator maior pode trazer pouco ganho em termos de oportunidade. Ao aumentar o volume do reator de 4,0 para 4,1 m³, ocorre a queda abrupta de robustez, a qual não é acompanhada com uma proporcional redução da oportunidade. Portanto, conclui-se que é desaconselhável adotar volume de reator maior do que o definido pelo critério de máxima robustez, como fica evidente ao olharmos para a Figura 4.58, em que a inclinação das curvas de lucro esperado em relação ao aumento do volume de reator não é tão íngreme.

Para o ajuste do modelo CPO, distribuição uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões B, as relações entre aumento de recompensa crítica e redução de robustez e de oportunidade mostradas na Tabela 4.23 tem uma variação mais expressiva, demonstrando que é cabível um julgamento se vale a pena arriscar, diminuindo a robustez do projeto devido à possibilidade de potencializar lucros muito acima do usualmente esperado (recompensa dos sonhos mais selvagens,  $R_w$ ).

O projetista é obrigado, ao decidir o nível de risco que julga confortável diante de incertezas severas, a se basear em uma atitude que pode pender entre o extremo da atitude conservadora e refratária aos estímulos da oportunidade de lucros muito elevados (e risco elevado de perda) e o extremo da atitude ousada de um apostador que não considera em seu julgamento a possibilidade de perda. A atitude do projetista diante da conjunção incerteza/risco pode ser expressa na forma de taxas de câmbio máximas admissíveis e o limite de robustez mínima. Como exemplo, suponha que a comparação (Tabela 4.23) entre o projeto de máxima robustez  $\{1,27 \text{ m}^3; 0,570 \text{ h}\}$  com  $R_c = \text{US}\$$  32,3 milhões e o projeto  $\{1,40 \text{ m}3; 0,523 \text{ h}\}$  com  $R_c = \text{US}\$$  39,0 milhões.

$$\frac{\Delta Lucro}{-\Delta Robustez} = \frac{(39,0-32,3)}{-(0,475-0,545)} = 95,7 \text{ US\$ milhões/robustez}$$

$$\frac{\Delta Oportunidade}{\Delta Robustez} = \frac{(0,150 - 0,279)}{(0,475 - 0,545)} = 1,84$$

Para o projetista avaliar este caso, ele deve estipular três parâmetros:

- Razão (-Δ*Lucro*/Δ*Robustez*): quanto maior esta razão, mais conservadora é a atitude do projetista. Como exemplo, o projetista pode considerar um fator acima de 90,0 US\$ milhões/robustez aceitável;
- Razão (Δ*Oportunidade/ΔRobustez*): quanto maior esta razão, mais favorável é o cenário de conseguir lucros muito acima da expectativa devido uma decisão mais ousada. Como exemplo, o projetista pode considerar a razão mínima de 1,70 como aceitável;
- Limite de Robustez mínima, abaixo do qual o projetista interrompe qualquer análise do *trade off* entre oportunidade de ganho e o risco de perda.
   Consideremos que este limite seja α = 0,450.

Considerando os parâmetros supostos acima, o projetista pode julgar válida a decisão de expor-se a um risco maior, aumentando, por exemplo, o volume do reator de 1,27 para 1,40 m<sup>3</sup>. Caso alguns dos critérios não sejam atendidos, a decisão será manter a configuração inicial.

Deve-se ainda considerar as condições de projeto podem variar muito com as condições em que foram realizados os estudos de estimação de parâmetros. Segundo a Tabela 4.21, parece óbvio que os volumes ótimos sempre caem com o aumento da incerteza paramétrica, com conseqüente aumento dos tempos de residência e redução dos lucros esperados. Portanto, soa muito estranho que estudos de projeto não

considerem as incertezas paramétricas durante a fase de avaliação de riscos e ganhos inerentes ao projeto. Diante do nível de incertezas paramétricas, todos os demais fatores parecem menos importantes. Portanto, a correta caracterização da região de confiança paramétrica parece fundamental para a correta caracterização dos riscos de projeto, não sendo satisfatória a estratégia usual que faz uso de aproximações normais em modelos não lineares sujeitos a erros significativos.

# 4.5 DETERMINAÇÃO DOS PREÇOS DE EQUILÍBRIO PARA OPERAÇÃO DOS PROJETOS

Toda a análise de incertezas realizadas até aqui foi focada nas incertezas paramétricas. Foi admitido como hipótese simplificadora que os preços do produto B, do sub-produto C e da matéria-prima A eram constantes durante todo o período de tempo de vida do projeto, assim como o custo operacional. Admitiu-se ainda que as demandas do mercado pelos produto B e subproduto C são suficientemente grandes para absorver qualquer quantidade produzida, sem afetar os preços finais. Da mesma forma, a oferta de produto A foi considerada como suficientemente grande para permitir o suprimento de qualquer quantidade da matéria-prima sem afetar o seu custo de aquisição.

Sabendo que variações de preços podem influenciar fortemente a lucratividade do empreendimento, foram verificados os preços de equilíbrio que satisfazem a condição de lucro zero ao final do período de análise. Supondo que o preço de venda do sub-produto C e o custo operacional sejam constantes por todo o período, conclui-se que:

$$C_B US\$B - C_{A0} US\$A = US\$Q + US\$V \frac{V\Theta}{\Delta t} - C_c US\$C$$
 (4.35)

Os resultados da Equação (4.35) para o ajuste do Modelo CPO, distribuição de probabilidade uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões A estão dispostos na Figura 4.74. A Figura 4.75 apresenta os resultados para o ajuste do Modelo CPO, distribuição de probabilidade uniforme, estimação de parâmetros por FMQP e vetor de desvios padrões B. Considerando que *Margem Bruta* consiste na

diferença entre o preço de venda do produto B e o custo da matéria-prima A, então para o caso padrão:

$$Margem\ Bruta = US\$B - US\$A = 20,00 - 4,00 = 16,00\ US\$/kg$$

A margem bruta média de equilíbrio e o preço da matéria-prima A representam os preços médios mínimos para garantir que não haja prejuízo na operação do processo para diversas vazões de operação. Quando a margem bruta média de equilíbrio é maior que a margem bruta realizada, o processo encontra-se em uma condição que gera prejuízo; ou seja, para um determinado volume de reator, existe uma vazão mínima de operação a partir da qual o processo torna-se lucrativo. Para o caso de margem bruta realizada de 16,00 US\$/kg e preço de A igual a 4,00 US\$/kg, verifica-se pela Figura 4.76, o reator de 4 m³ somente é lucrativo para tempos de residência acima de 0,14 h.

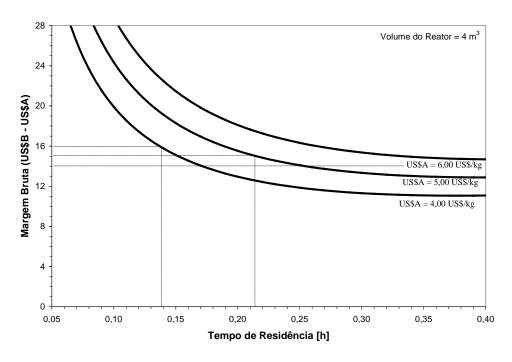


Figura 4-75: Margem bruta média de equilíbrio para o ajuste Modelo CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP. Foi feita a média da margem bruta calculada para as seguintes condições: Volume do reator =4,0 m3; Condição 1: { $k_I = 2,4662 \text{ h}^{-1}$ ;  $k_2 = 1,0737 \text{ h}^{-1}$ } (condição do projeto de robustez máxima) e Condição 2: { $k_I = 2,6328 \text{ h}^{-1}$ ;  $k_2 = 0,9905 \text{ h}^{-1}$ } (condição do projeto nominal).

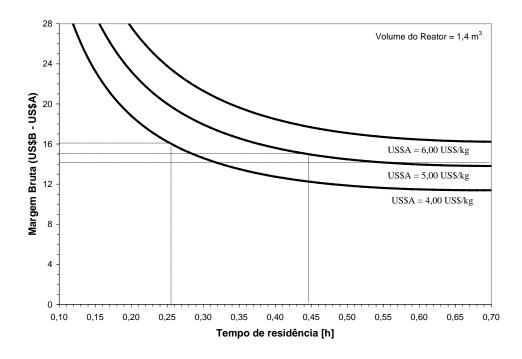


Figura 4-76: Margem bruta média de equilíbrio para o ajuste Modelo CPO, distribuição uniforme, vetor de desvios padrões A e estimação de parâmetros por FMQP. Foi feita a média da margem bruta calculada para as seguintes condições: Volume do reator =1,4 m3; Condição 1:  $\{k_I = 1,2437 \text{ h}^{-1}; k_2 = 1,0519 \text{ h}^{-1}\}$  (condição do projeto de robustez máxima) e Condição 2:  $\{k_I = 1,6675 \text{ h}^{-1}; k_2 = 0,9643 \text{ h}^{-1}\}$  (condição do projeto nominal).

Operar com tempo de residência abaixo disso representa prejuízo. Da mesma forma, pode-se afirmar pela Figura 4.76 que o reator de 1,4 m<sup>3</sup> somente é lucrativo para tempos de residência acima de 0,26 h.

Deve-se notar que se o custo de matéria-prima A for de 6,00 US\$/kg, mantendo-se o preço de venda do produto B de 20,00 US\$/kg, a margem bruta realizada cairá para 14,00 US\$/kg. Tanto na Figura 4.75 quanto na Figura 4.76 percebe-se que nestas condições de preços, todos os dois reatores dão prejuízo, independentemente do tempo de residência adotado. Conclui-se que as incertezas econômicas de demanda e as cotações futuras dos produtos e matérias-primas definidas pela Lei da Oferta e da Procura têm papel muito relevante no estudo de robustez dos projetos e não podem ser negligenciadas.

## 4.6 COMENTÁRIOS FINAIS

O estudo de caso aqui apresentado demonstra a proeminente necessidade de se avaliar a incerteza paramétrica em processos de dimensionamento de projetos. Mostrouse que a qualidade dos parâmetros depende da informação disponibilizada sobre um determinado processo e sua variabilidade inerente, que pode ser obtida por meio de experimentos ou observações. Um pequeno número de dados experimentais, inevitalmente, acarreta incertezas paramétricas maiores do que se tivesse disponível um número de dados maior e com várias réplicas para cada ponto. Foi mostrado também que o tipo de distribuição do erro experimental é irrelevante para a região de incerteza paramétrica.

Outra constatação importante é que a maneira como são estimados os parâmetros influencia fortemente a forma e a extensão da região de confiança paramétrica. Foi verificado que o procedimento de estimação de parâmetros com reconciliação de dados suaviza as perturbações dos erros experimentais sobre o valor do parâmetro e sua região de confiança.

A metodologia adotada por este trabalho permitiu verificar a impressionante amplitude da incerteza de projeto devido às incertezas paramétricas. Portanto, o critério de decisão tem papel-chave na escolha do melhor projeto, devendo ser considerado pelo projetista seu grau de aversão ao risco, como por exemplo, ao adotar o critério de robustez máxima. Similarmente, uma avaliação de pontos de equilíbrio, nos moldes do que foi apresentado na Seção 4.5, permite verificar a vulnerabilidade do projeto à oscilações de preços e de demanda e se precaver à elas.

Segundo o ponto de vista puramente operacional, um projeto baseado em variáveis de folga (ou de fatores de segurança) sugeriria o aumento do volume do reator para permitir que a incerteza fosse mais facilmente absorvida sem causar perda de desempenho. Todavia, todas as discussões apresentadas neste capítulo demonstram que neste caso que o aumento do volume do reator causaria também o aumento das incertezas sobre a lucratividade do projeto, o que talvez justificasse a execução de medições experimentais adicionais e mais cuidadosas. Sob este ponto de vista, o uso de variáveis de folga ou de fatores de segurança pode ser deletéria para o desempenho financeiro do processo.

## CAPÍTULO 5

## ESTUDO DE CASO 2 PROJETO DE UM SISTEMA DE BOMBEIO DE PETRÓLEO

Dentre as várias possíveis aplicações práticas da metodologia proposta pelo presente trabalho, foi escolhido o problema de dimensionamento de um sistema de bombeio de petróleo por duto. O transporte dutoviário de combustíveis líquidos e gasosos é economicamente competitivo para deslocamento de grandes volumes a longas distâncias.

Os dutos apresentam grandes vantagens em relação aos outros modos de transportes, a saber (RENNÓ & LEMGRUBER, 2009):

- alta confiabilidade, devido ao fato de que funciona em operação contínua.
   Usualmente os dutos não são afetados por condições adversas de tempo e atuam com alto grau de automação, o que torna o sistema dutoviário bastante seguro para o meio ambiente e para a população;
- O custo de operação é até 5 vezes menos dispendioso do que o transporte ferroviário e até 20 vezes menos dispendioso que o transporte rodoviário, o que favorece a redução de custos logísticos;
- menor consumo de energia em relação a outros modos de transporte para o deslocamento da mesma carga pela mesma distância;
- menor impacto ambiental, devido ao fato de que o duto está enterrado e não interfere na ocupação de vias de transporte e nem contribui com a poluição automotiva, minimizando o risco de acidentes.

## 5.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

O presente problema de dimensionamento consiste em projetar um duto de petróleo de 100 km de extensão entre um terminal e uma refinaria com capacidade de processamento de 200 mil barris/dia<sup>1</sup>. O duto deve permitir vazões que permitam suprir eficientemente a demanda diária da referida refinaria e vencer uma diferença de altura entre os tubos de descarga das bombas e o tanque recebedor de 500 m. O duto deve ser do tipo enterrado e o relevo do terreno no qual deve ser instalado tem um aclive suave, sem elevações ou depressões intermediárias, bem como nenhuma travessia de cursos d'água (rios e córregos). Tal hipótese dispensa a construção de estações de bombeamento intermediárias e custos adicionais de sobre-espessura, concretagem e outros serviços demandados em um procedimento de travessia de cursos d'água, o que simplifica os cálculos. Nas Figuras 5.1 e 5.2 encontram-se desenhos esquemáticos da vista superior e lateral do duto, respectivamente. O parque de bombas, conforme mostrado na Figura 5.2, é constituído por três bombas centrífugas multiestágio com a configuração sugerida por FALCO (2009): as duas primeiras bombas devem ser capazes de fornecer um head de 2/5 do head total cada uma e a última bomba deve ser capaz de fornecer 1/5 do head total necessário para o bombeio. Esta configuração permite uma grande flexibilidade de vazões intermediárias ao acionar qualquer bomba, deixando uma ou duas paradas. Isto facilita em muito o controle de pressão e de vazão, tornando dispensável o expediente de estrangular a descarga, o que significa desperdício de energia.

O traçado do duto exige a instalação dos seguintes acidentes listados na Tabela 5.1, com as respectivas perdas de carga. O custo total referente ao investimento para construção do duto é constituído de diversas rubricas, conforme disposto na Tabela 5.2. O investimento do duto é proporcional ao diâmetro, à espessura dos tubos e ao tipo de aço empregado, bem como à extensão do duto.

Os segmentos de tubos para dutos (*linepipe*), empregados no transporte de óleo e gás, obedecem às especificações estabelecidas por certas normas internacionais. Dentre

\_

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Para manter a similaridade com o problema real de projeto de engenharia, foi adotada as unidades inglesas já consagradas na área de engenharia de petróleo e dimensionamento de bombas, enquanto para medidas de distâncias foi mantida as unidades no sistema SI.

as normas mais difundidas pelo mundo, a norma API 5L (*Specification for Linepipe*) é a mais amplamente utilizada no Brasil.

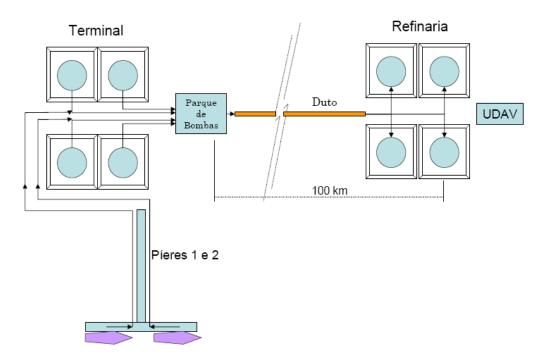


Figura 5-1: Esquema da vista superior de dimensionamento de um sistema de bombeio de petróleo. UDAV refere-se ao conjunto de unidades de destilação atmosférica e à vácuo da refinaria.

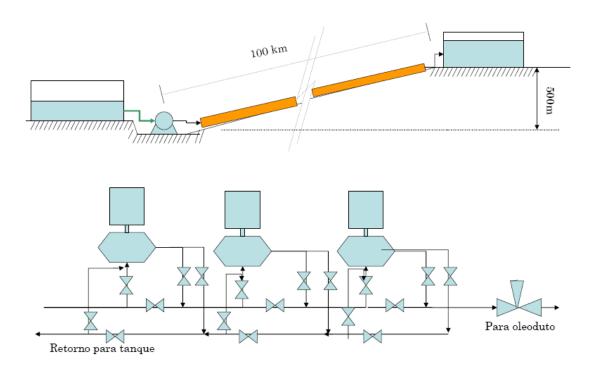


Figura 5-2: Esquema da vista lateral do problema de dimensionamento de um sistema de bombeio de petróleo. Logo abaixo, é mostrada a configuração do parque de bombas constituídas de 3 bombas centrífugas multiestágio em série.

Tabela 5.1: Lista de conexões e acessórios de tubulação presente no sistema de duto a ser projetado, bem como os respectivos valores de perda de carga associada (LUDWIG, 1999; KERN, 1975).

como os respectivos valores de perda de carga associ	ada (LUDW)	10, 1999,	KEKN, 1973).
			Comprimento equivalente L <sub>eq</sub>
Descrição do Acidente da Tubulação	Quantidade	K	(ft), referente ao
			diâmetro de 24 in
Tubulação de Sucção (do tanque at	é flange de si	ıccão)	diametro de 24 m
Bocal flangeado do tanque	1	0,5	
Válvula gaveta (totalmente aberta)	2	$8  f_T^{\ \dagger}$	
Curva 90° de raio longo	2	14 f <sub>T</sub>	
Curva T com fluxo através por 1 dos ramais	2		120
Curva T com fluxo direto	2		38
Redução para flange de sucção da bomba 24/20 45°	1	*	
Tubulação reta	1		3281
Tubulação de desca	rga		
Válvula gaveta (totalmente aberta)	6	$8~{\rm f_T}^\dagger$	
Curva 90° de raio longo	9	$14 f_T$	
Válvula de controle globo (totalmente aberta)	1	55 f <sub>T</sub>	
Curva T com fluxo através por 1 dos ramais	5		120
Redução para flange de sucção da bomba 24/20 45°	2		
Curva 90° de raio longo no scrapper	2	$14 f_T$	
Curva T com fluxo através por 1 dos ramais (scrapper)	2		120
Curvas de afloramento do duto	2	0,1	
Curvas a frio realizada na trajetória do duto R/D =10	6	0,08	
Curva 90° de raio longo (dentro do terminal recebedor)	4	14 f <sub>T</sub>	
Curva T com fluxo através por 1 dos ramais	2	2,0	120
Válvula gaveta (totalmente aberta no terminal recebedor)	3	$8 f_T$	
Bocal flangeado do tanque	1	0,5	
Tubulação reta	1		328.084

<sup>\*</sup> Perda de carga calcula pela Equação  $K = \frac{0.8sen\frac{\theta}{2}(1-\beta^2)}{\beta^4}$ , onde  $\beta = \frac{d_1}{d_2}$  sendo o subscrito 1 referente ao menor diâmetro e o subscrito 2 ao maior diâmetro (LUDWIG, 1999).

### 5.1.1. Discriminação dos custos associados ao projeto

A norma mencionada estabelece onze graus de resistência para o material constituinte de tubos adequados para aplicação de transporte de óleo e gás, conforme mostrado na Tabela 5.3. Adicionalmente, a norma API 5L estabelece níveis de especificação PSL1 e PSL2, os quais se diferenciam em termos de exigências sobre a composição química, propriedades mecânicas, inspeções não-destrutivas, certificações e rastreabilidade (VIEIRA, 2009). A Tabela 5.3 apresenta o custo especifico dos tubos API 5L para cada grau de resistência e nível de especificação.

<sup>†</sup>  $f_T$  é o fator de atrito de tubos que é uma função  $f_T$  (Re,  $\epsilon$ /D) calculada por meio da Equação (5.32).

Tabela 5.2: Lista de itens mais representativos dos custos de investimento para construção de um duto de petróleo e suas respectivas estimativas.  $D_N$  representa o diâmetro nominal do tubo dado em polegadas e L é a extensão do duto dado em quilômetros (RENNÓ e LEMGRUBER, 2009; PARKER, 2004).

Custo de Material  - Custo de tubos - Válvulas e conexões - Insumos para solda - Insumos diversos  Custo de Mão-de-obra - Limpeza de faixa - Escavação da vala - Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos e sexcutivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistema de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way) - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo de contrapartidas ambientais	é a extensão do duto dado em quilômetros (RENNO e LEMGRUBER, 2009; PARKER, 2004).				
- Custo de tubos - Válvulas e conexões - Insumos para solda - Insumos diversos  Custo de Mão-de-obra - Limpeza de faixa - Escavação da vala - Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistema de supervisão operacional remota - Travessias de comunicação, incluindo fibra ótica - Sintema de supervisão operacional remota - Travessias de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistema de supervisão operacional remota - Travessias de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistema de supervisão operacional remota - Travessias de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistema de supervisão operacional remota - Travessias de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistema de proteção catódica - Cruzamento de vias - Obras de construção, incluindo fibra ótica - Controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  C2 (Vide Tabela 5.4)  Custos de Licenciamento (Right of way) - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo de contrapartidas ambientais - Custo de contrapartidas ambientais - Custo de contrapartidas ambientais		to do Duto			
- Válvulas e conexões - Insumos para solda - Insumos diversos  Custo de Mão-de-obra  - Limpeza de faixa - Escavação da vala - Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way) - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de					
- Insumos para solda - Insumos diversos  Custo de Mão-de-obra - Limpeza de faixa - Escavação da vala - Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de					
- Insumos diversos  Custo de Mão-de-obra  - Limpeza de faixa - Escavação da vala - Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo de contrapartidas ambientais - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de		C <sub>1</sub> (vide Tabela 5.3)			
Custo de Mão-de-obra  - Limpeza de faixa - Escavação da vala - Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	1				
- Limpeza de faixa - Escavação da vala - Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way) - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de					
- Escavação da vala - Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way) - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	Custo de Mão-de-obra				
- Abaixamento da tubulação - Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  - Custos de Licenciamento (Right of way) - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	<u> </u>				
- Soldagem dos tubos - Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way) - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de					
- Construção e montagem do duto - Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Abaixamento da tubulação				
- Recobrimento da vala - Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia  - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de		$[213,1 D_N^2 + 426,9 D_N + 16.752,2].L + 185.000$			
- Recomposição e revegetação da faixa  Custos Miscelânia  - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way) - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Construção e montagem do duto				
Custos Miscelânia  - Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Recobrimento da vala				
- Projetos executivos - Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de					
- Supervisão - Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	Custos Miscelânia				
- Transporte e desfile dos tubos - Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	9				
- Teste hidrostático - Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Supervisão				
- Inspeções e ensaios exigidos por normas - Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Transporte e desfile dos tubos				
- Sistema de proteção catódica - Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Teste hidrostático				
- Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica - Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Inspeções e ensaios exigidos por normas				
- Sistemas de supervisão operacional remota - Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Sistema de proteção catódica				
- Travessias de cursos d'água - Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Sistemas de comunicação, incluindo fibra ótica	$[5.230,1 D_N + 4.550,9].L + 95.000$			
- Cruzamento de vias - Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Sistemas de supervisão operacional remota				
- Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização e controle de acesso ao trecho do duto - Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Travessias de cursos d'água				
e controle de acesso ao trecho do duto  - Contigências  - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades  - Indenização de culturas e benfeitorias  - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais  - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Cruzamento de vias				
- Contigências - Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Obras de construção civil para garantir apoio, sinalização				
- Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	e controle de acesso ao trecho do duto				
- Primeiro Inventário da linha  Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	- Contigências				
Custos de Licenciamento (Right of way)  - Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.  - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	=	C <sub>2</sub> (Vide Tabela 5.4)			
- Cadastramento das propriedades - Indenização de culturas e benfeitorias - Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc. [358,4 D <sub>N</sub> + 18.509,4].L + 40.000 - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	Custos de Licenciamento (Right of way)				
<ul> <li>Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.</li> <li>Custo de contrapartidas ambientais</li> <li>Custo para atendimento a condicionantes da licença de</li> </ul>					
<ul> <li>Direitos de permissão de passagem, benfeitorias para proprietários, etc.</li> <li>Custo de contrapartidas ambientais</li> <li>Custo para atendimento a condicionantes da licença de</li> </ul>	- Indenização de culturas e benfeitorias				
proprietários, etc. $[358,4 D_N + 18.509,4].L + 40.000$ - Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de	=				
- Custo de contrapartidas ambientais - Custo para atendimento a condicionantes da licença de		$[358,4D_N + 18.509,4].L + 40.000$			
- Custo para atendimento a condicionantes da licença de					
	operação				

Tabela 5.3: Propriedades mecânicas especificadas segundo a norma API 5L para tubos de aço e o seu custo de aquisição (VIEIRA, 2009; PARKER, 2004).

Resistência mecânicas de dutos de transporte de óleo e gás especificadas						
	pela n	orma API 5	iL		Custo d	o tubo
Grau de resistência	Resistência míni escoamento (SI especificada para e PSL 1 e PSI	MYS) os níveis	Resistência míni escoamento (SI especificada para PSL 2	MYS)	PSL-1	PSL-2
	Mpa	kpsi	Mpa	kpsi	US\$/lb	US\$/lb
A25	172	25			0,30	
A	207	30			0,34	
В	241	35	448	65	0,38	0,63
X42	290	42	496	72	0,42	0,69
X46	317	46	524	76	0,46	0,71
X52	359	52	531	77	0,50	0,72
X56	386	56	544	79	0,54	0,74
X60	414	60	565	82	0,60	0,76
X65	448	65	600	87	0,65	0,77
X70	483	70	621	90	0,70	0,77
X80	552	80	690	100	0,74	0,78

O custo dos tubos é apurado em termos de massa de aço referente aos tubos, sendo que quanto maior o diâmetro nominal e a espessura de parede do tubo, maior será a massa de aço por unidade de comprimento. O Anexo I contém dados de espessuras padrões para diversos diâmetros nominais dos tubos encontrados no mercado. Para cada diâmetro nominal e espessura de parede, é listada a massa de aço por unidade de comprimento de tubo, o que juntamente com a extensão do duto determina o custo dos tubos necessários para construção do oleoduto. O custo instalado de cada uma das três bombas, cujo detalhamento das parcelas é discriminado na Tabela 5.4, pode ser calculado da seguinte forma:

Custo unitário Bomba instalada = 
$$1,2 \cdot 10^6 \times \left(\frac{H}{675}\right)^{0,50} \left(\frac{Q}{7.300}\right)^{0,35}$$
 (5.1)

Tabela 5.4: Lista de itens constituintes do Custo de capital devido investimento para construção do sistema de bombeio, bem como o Custo operacional mensal do terminal de petróleo(RENNÓ e LEMGRUBER, 2009; CEMIG, 2010).

LEMGRUBER, 2009; CEMIG, 2	.010).
Custo do sistema de bombeio	
aquisição das bombas	
frete, seguro e impostos até o local de instalação	
instalação das bombas	Vide Equação 5.1
montagem de linhas e motores motrizes	
Obras de construção civil diversas	
Custo Operacional sistema de bombeio	
Consumo de Energia elétrica pelas Bombas Tarifa Azul	Dias úteis exceto entre 18-21h, fim de semanas e feriados: US\$ 101,82/MWh
	Entre 18-21h dos dias úteis: US\$ 163,55/MWh
conservação e manutenção da faixa de passagem do duto	
pessoal (salários e benefícios)	
inspeção e manutenção de equipamentos	
manutenção do sistema de proteção catódica	
equipamentos e ferramentas	
comunicação	
treinamentos	
veículos para apoio operacional e para manutenção	US\$ 2.400.000/mês
seguros impostos e taxas	
aquisição de pig instrumentado	
inspeções geológicas	
avaliação da integridade do revestimento externo	
gerenciamento de riscos	
reparos emergenciais ou serviços de reabilitação	

A Tabela 5.4 apresenta o custo operacional correspondente ao consumo de energia elétrica para bombeamento e às rubricas de pagamento de mão-de-obra, inspeções e manutenções preventivas. O custo referente ao consumo de energia elétrica para bombear o petróleo, considerando um fator de eficiência do motor elétrico de 0,95 é dado por:

Consumo de Energia = Tarifa 
$$\times \frac{Pot}{0.95} \cdot \Delta t$$
 (5.2)

onde Pot é a potência requerida pela bomba centrífuga para bombear expresso em MW e  $\Delta t$  é tempo de bombeio em horas.

O investimento referente à construção de tanques de aço soldado API 650 para armazenamento de petróleo cru, incluindo custos de tanques, tubulação, bombas de transferência, diques, equipamentos de combate à incêndio, automação pode ser estimado por (GARY *et al.*, 2007; McALLISTER, 2009):

Custo Tancagem = US
$$$130 \times 516.000^{0.30} \times CN^{0.70}$$
 (5.3)

onde *CN* é a capacidade nominal de estocagem expressa em barris. No presente serão considerados tanques de aço soldado com teto flutuante, construídos no padrão estabelecido pela norma API 650, cujas dimensões e capacidades são registradas na Tabela 5.5. Tanques de petróleo em condições de operação usual não permitem o total esgotamento do petróleo contido nele, pois o bocal de sucção situa-se a cerca de 1-1,5 m do fundo do tanque, tornando a capacidade de volume bombeável menor do que a capacidade nominal do tanque. Outro detalhe importante é que tanques de armazenamento de petróleo devem ser compulsoriamente tanques com teto flutuante por questão de segurança, devido à alta pressão de vapor e por ser inflamável (BARROS, 2003). Por esse motivo, a altura máxima de enchimento do tanque é menor do que sua altura nominal, pois o teto flutuante deve permanecer flutuando na seção horizontal, abaixo da extremidade superior do costado do tanque.

Tabela 5.5: Dimensões e informações sobre capacidade e lastro de tanques de aço soldado com teto flutuante para armazenamento de petróleo.

natuante para armazenamento de perforeo.					
Dimensão (ft)	Volume (bbl)				
Diâmetro Altura total	220 56 Capacidade Nominal		379.400		
Altura total					
Lastro (altura do fundo até bocal)	6	Lastro imobilizado	40.619		
Coluna de líquido máxima	52	Capacidade total	352.035		
Faixa operacional	46	Capacidade operacional	311.416		

O terminal trabalhando com apenas uma espécie de petróleo necessita de um número mínimo de três tanques em condições operacionais para um estar recebendo, um estocando e outro enviando ao longo de todo o tempo de vida do projeto. Adicionalmente, um tanque sobressalente deve ser considerado em razão do rodízio de manutenção e limpeza de tanques pelo qual um dos tanques permanece indisponível.

A possibilidade de realizar misturas binárias de petróleo no terminal está condicionada à construção de dois tanques adicionais para estocar o segundo tipo de petróleo, sendo que um envia petróleo para o oleoduto, para que a mistura seja feita em linha e o outro estoca um certo volume, para garantir que a injeção em linha, seja contínua. Para que misturas ternárias sejam executadas, pelos mesmos motivos explicitados anteriormente são necessários dois tanques adicionais, para estocar e enviar o terceiro tipo de petróleo, sendo um tanque sobressalente para rodízio.

Na refinaria, também são necessários no mínimo três tanques em condições operacionais e um tanque reserva. Tanques adicionais podem ser requeridos, dependendo do estabelecimento do nível de estoque mínimo e médio, os quais podem ser calculados conforme abaixo (ERTHAL, 2006).

$$t_{preparo} = \frac{CO}{\overline{Q}} + t_{repouso} + t_{troca}$$
 (5.4)

$$\Delta Estoque(t_{preparo}) = Refino \times t_{preparo}$$
 (5.5)

$$\Delta Estoque(t_{interrup}) = Refino \times t_{interrup}$$
 (5.6)

$$t_{recup} = \frac{\Delta E stoque(t_{interrup})}{(\overline{Q} - \text{Refino})}, \text{ onde } \overline{Q} > \text{Refino}$$
 (5.7)

Se 
$$t_{recup} > 72 \text{ h}$$
 (5.8)

 $Estoque_{min} = \Delta Estoque(t_{preparo}) + \Delta Estoque(t_{interrup}) - (\overline{Q} - Refino)x$  72 h

Senão:

 $Estoque_{min} = \Delta Estoque(t_{preparo})$ 

Portanto:

$$Estoque_{m\acute{e}dio} = Estoque_{min} + \frac{CO}{2}$$
 (5.9)

$$N_{tq} = \frac{Estoque_{medio}}{CO} \tag{5.10}$$

onde  $t_{preparo}$  é o tempo de preparo de um tanque em horas;  $t_{repouso}$  é o tempo de repouso de 24 h que um tanque de petróleo cheio deve permanecer para garantir a decantação de eventual presença de água emulsionada;  $t_{troca}$  é o intervalo de tempo para realizar a troca de um tanque que está próximo de se esvaziar para o outro cheio. Durante este período, os dois tanques ficam alinhados para a unidade de destilação, sendo que a válvula do primeiro é gradativamente fechada e a válvula do segundo é, gradativamente, aberta, o que torna a transição suave. Aqui é admitido como sendo 2 h; CO é o capacidade operacional de um tanque igual a 483.400 bbl (vide Tabela 5.5);  $\overline{Q}$  é a vazão média do oleoduto dado em bbl/h;  $t_{interrup}$  é o intervalo de tempo em que o bombeio pelo oleoduto hipoteticamente permanece interrompido devido a uma falha qualquer. Para o presente caso é considerada uma interrupção de 12 h;  $t_{recup}$  é o intervalo de tempo necessário para que o estoque na refinaria retorne a seu patamar imediatamente anterior à interrupção de recebimento de petróleo pelo oleoduto.

O custo para manter estoques de petróleo na refinaria e no terminal além do capital investido na construção de tanques e da infra-estrutura associada tem uma parcela relacionada a perda de ganhos com a imobilização de ativos monetários na forma de matéria-prima. O capital imobilizado como estoque poderia ser investido em outro empreendimento com uma determinada taxa de retorno, descontando-se a taxa de inflação do período. Supondo que a taxa de retorno seja 7,5% a.a. e uma taxa de inflação de 5% a.a., tem-se uma taxa acima da inflação de 2.5% a.a.

onde b é o número de anos do tempo de vida do projeto e i é a taxa de retorno acima da inflação.

O elenco de petróleo disponível para suprir a refinaria é constituído por quatro petróleos, cujas propriedades relevantes estão dispostas na Tabela 5.6. Os petróleos podem ser bombeados misturados. Todavia, as misturas estão restritas a no máximo três componentes, pois quanto maior o número de componentes em uma mistura, maior a demanda por tanques no terminal ou na refinaria.

Tabela 5.6: Propriedades relevantes dos petróleos disponíveis para bombeio pelo duto.

Propriedades		Petróleo B	•	
°API	23.0	19.8	18.0	48
Densidade relativa 60°F/60°F	0.9159	0.9352	0.9465	0.7883
Viscosidade Cinemática a 20°C (cSt)	120	400	910	3
Viscosidade Cinemática a 30°C (cSt)	65	200	420	2
Parâmetro visc./temperatura A	10.298	9.431	9.318	20.019
Parâmetro visc./temperatura B	4.045	3.654	3.586	8.214
Número de Acidez total (mg KOH/g)	0.60	1.20	2.70	0.05
Número de Acidez do Corte Diesel Pesado (mg KOH/g)	0.85	1.70	4.85	0.12
Teor de Enxofre do Corte Diesel Leve+Pesado (%m)	0.54	0.57	0.57	0.04
Rendimento Gás combustível (%vol)	1.0	0.4	1.3	2.0
Rendimento Nafta (%vol)	12.0	8.3	5.3	33.5
Rendimento Querosene (%vol)	8.0	6.0	5.0	15.0
Rendimento Diesel Leve+Pesado (%vol)	27.2	31.0	23.4	36.2
Rendimento Diesel Pesado (%vol)	13.4	16.0	13.0	13.8
Rendimento Gasóleo (% vol)	25.0	26.7	31.0	10.6
Rendimento Resíduo de Vácuo (%vol)	26.8	27.6	34.0	2.7
Rendimento Gás combustível (%m)	0.7	0.3	0.9	2.4
Rendimento Nafta (%m)	9.8	6.7	4.3	30.7
Rendimento Querosene (%m)	7.2	4.9	4.5	14.9
Rendimento Diesel Leve+Pesado (%m)	26.4	29.7	22.3	38.0
Rendimento Diesel Pesado (%m)	13.4	15.9	13.9	14.8
Rendimento Gasóleo (%m)	26.0	23.9	31.3	10.6
Rendimento Resíduo de Vácuo (%m)	29.9	34.5	36.7	3.4

Os petróleos são negociados no mercado internacional como uma *commodity*<sup>2</sup> cujo preço de compra é definido em função do seu °API, teor de enxofre, número de acidez total por intermédio de prêmios e descontos referenciados a um petróleo

\_

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Palavra inglesa que significa mercadoria, mas no mercado financeiro é utilizado para indicar um tipo de produto, geralmente agrícola ou mineral, de grande importância econômica internacional e de baixo valor agregado, amplamente negociado entre importadores e exportadores. Existem bolsas de valores que as negociam, definindo cotações de forma dinâmica. Oscilações dessas cotações exercem imenso impacto sobre o fluxo financeiro mundiais (FULGÊNCIO, 2007).

benchmark<sup>3</sup>. Dentre os petróleos benchmarks, destaca-se o WTI, Brent datado e o Dubai. As cotações dos petróleos A-D e do Brent datado são apresentados na Tabela 5.7. Os prêmios e descontos de cada petróleo em relação ao benchmark são denominados spread (JAMES, 2008).

Por simplificação, o presente caso representará os ganhos advindos do processamento de petróleo pela refinaria em termos de margem bruta de refino. A margem bruta de refino consiste na diferença entre os preços de venda dos produtos derivados de petróleo e o custo de aquisição das matérias-primas. Não são contabilizados na margem bruta de refino os custos operacionais, consumo de utilidades, fretes, seguros e impostos. Além das cotações dos derivados e dos petróleos, a margem bruta de refino é ditada pelo grau de complexidade da refinaria. Quanto maior o número de unidades de conversão, tais como a unidade de craqueamento catalítico fluido (UCCF) e a unidade de coqueamento retardado (UCR), maior a margem bruta de refino, pois cortes pesados de baixo valor comercial são convertidas em correntes intermediárias que gera mais produtos nobres, como a gasolina e o óleo diesel.

No presente estudo de caso, supôs-se uma refinaria apenas dotada de UCCF. O corte de resíduo de vácuo, portanto, gera óleo combustível, ao ser diluído com óleo leve de reciclo (LCO) proveniente da UCCF. A receita bruta para cada corte de petróleo é apresentada na Tabela 5.7.

Tabela 5.7: Cotações absolutas e spreads (preço referenciado) dos petróleos disponíveis para processamento, bem como receita bruta obtida para cada corte do petróleo.

	Spread	Cotação absoluta			
	(US\$/bbl)				
Petróleo	(054/001)	(US\$/bbl)			
Brent datado	0,00	74,00			
Petróleo A	-14,00	60,00			
Petróleo B	-8,00	66,00			
Petróleo C	-14,50	59,50			
Petróleo D	0,30	74,30			
Cortes do petróleo	Receita Bruta	Receita Bruta (US\$/bbl)			
GLP	59,0	00			
Nafta	75,68				
Querosene	87,0	87,00			
Diesel leve+pesado	88,00				
Gasóleo de vácuo	84,63				
Resíduo de vácuo	66,30				

\_

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Termo que designa um determinado petróleo de reconhecida estabilidade de produção e de disponibilidade usado como referência no processo de estabelecimento do preço spot (cargas com data de embarque definido), o que representa o ponto equilíbrio entre a oferta e demanda por petróleos. O sistema de óleos marcadores (benchmarks) foi introduzido nos anos de 1980 e tem tido geral aceitação pelo mercado desde então, como sistema robusto e imune a manipulação tendenciosa. As cotações dos benchmarks balizam os preços de todos os petróleos vendidos tanto no mercado presente (carga física), quanto no mercado futuro (JAMES, 2008).

### 5.1.2. Restrições adotadas para o projeto

Como todo modelo de otimização, o presente projeto deve satisfazer um conjunto de requisitos obrigatórios, os quais constituem restrições aos graus de liberdade que as variáveis de projetos podem assumir. Algumas dessas restrições têm motivações físicas e econômicas e outras refletem obrigações de garantia de qualidade e de minimização de impacto ambiental. As restrições do presente projeto são as seguintes:

$$Visc \le 160,0 \text{ cSt a } 25 \text{ °C}$$

$$(5.12)$$

$$S_{\rm m} \le 0.5300 \,\text{\%m}$$
 (5.13)

$$NATDP \le 1{,}70 \text{ mg KOH/g} \tag{5.14}$$

$$NATOC \le 1,20 \text{ mg KOH/g}$$
 (5.15)

Rendimento Nafta 
$$\leq 17,0 \%$$
 vol (5.16)

Rendimento RAT 
$$\leq$$
 58,0 %vol (5.17)

onde  $S_{\rm m}$ é o teor de enxofre do corte diesel leve e pesado dado em porcentagem mássica; NATDP e NATOC são os números de acidez total do corte de diesel pesado e do petróleo cru em mg KOH/g, respectivamente e Visc é a viscosidade cinemática a 25 °C da mistura de petróleo, medido em cSt. As propriedades aqui citadas, adicionalmente à densidade relativa, são calculadas para a mistura resultante a partir dos dados dos petróleos individuais.

$$Dens_m = \sum_{i}^{N} x_i . Dens_i \tag{5.18}$$

$$y_{i} = \frac{x_{i}.Dens_{i}}{\sum_{i}^{N} x_{i}.Dens_{i}}$$
 (5.19)

$$NATOC_{m} = \frac{y_{i}.NATOC_{i}}{\sum_{i}^{N} y_{i}.NATOC_{i}}$$
(5.20)

$$\operatorname{Re} ndV_{j} = \sum_{i}^{N} x_{i}.\operatorname{Re} ndV_{ij}$$
(5.21)

$$\operatorname{Re} ndM_{j} = \sum_{i}^{N} y_{i}.\operatorname{Re} ndM_{ij}$$
(5.22)

$$NATDP_{m} = \frac{y_{i}.\text{Re } ndM_{DPi}.NATDP_{i}}{\sum_{i}^{N} y_{i}.\text{Re } ndM_{DPi}.NATDP_{i}}$$
(5.23)

$$S_{m} = \frac{y_{i}.\operatorname{Re} ndM_{DLPi}.S_{i}}{\sum_{i}^{N} y_{i}.\operatorname{Re} ndM_{DLPi}.S_{i}}$$
(5.24)

onde  $x_i$  e  $y_i$  são as frações volumétrica e mássica do petróleo cru i, respectivamente. A viscosidade cinemática da mistura é calculada pelo Método de Refutas empregando base mássica (MAPLES, 2000):

$$VBI_{i} = 14,534 \cdot \ln(\ln(Visc_{i} + 0.8)) + 10,975$$
(5.25)

$$VBI_{m} = \sum_{i}^{N} y_{i} VBI_{i}$$
 (5.26)

$$Visc_m = \exp\left[\exp\left(\frac{VBI_m - 10,975}{14,534}\right)\right] - 0,8$$
 (5.27)

O problema de dimensionamento do diâmetro do duto pode ser formulado conforme abaixo, a partir da definição a priori da vazão de projeto e da composição da mistura de petróleo que será processada pela refinaria.

$$\underset{x_{i}...x_{N},D,e,Mat}{\textit{Max}} \left[ RB\left(x_{i}...x_{N},PC_{j}...PC_{NC},PP_{i}...PP_{N}\right) - Custo\left(x_{i}...x_{N},D,e,Q,PE,Op,Mat\right) \right] (5.28)$$

sujeito às :

i) restrições operacionais descritas pelas Equações 5.12-17;

- *ii)* NPSH disponível > NPSH requerido;
- *iii*)  $V_{suc} \leq V_{suc, max}$ ;
- iv)  $V_{desc} \leq V_{desc, max}$ ;
- v)  $e \geq e_{min}$ ;
- vi) Equação de cálculo de espessura 5.29.

onde RB é a renda bruta em US\$,  $x_i$  é a fração volumétrica do petróleo i,  $PC_j$  é a renda advinda com o processamento do corte j,  $PP_i$  é a cotação do petróleo i, D é o diâmetro do duto, e é a espessura de parede do duto, Q é a vazão do duto, PE é o custo da energia elétrica, Op é o custo operacional e Mat é o tipo de aço utilizados pelos tubos. A espessura da parede do tubo é obtida por meio da equação de Lamé modificada com o critério de Rankine (LOUZADA, 2009):

$$e = \frac{D}{2} \left( 1 - \sqrt{\frac{\sigma_{adm} - p}{\sigma_{adm} + p}} \right) \tag{5.29}$$

#### 5.2 RESULTADOS

Em geral, todo projeto baseia-se na escolha de um cenário de projeto tais como cotações de produtos, de petróleos, custo de tubos em função do diâmetro e material de construção, custo de energia, entre outros. Considerando as condições e parâmetros apresentados nas Tabelas 5.1-5.7, os resultados do dimensionamento segundo a Equação (5.28) para diferentes vazões de projeto são listados nas Tabelas 5.8a-c.

O algoritmo empregado para encontrar a mistura de petróleo e o dimensionamento ótimo de duto e bombas utiliza o MEP, cuja estrutura é exposta no Apêndice VI, com os valores assumidos para cada varíavel de entrada e parâmetros de busca.

O procedimento de dimensionamento das bombas baseia-se na aplicação do conceito de velocidade especifíca, N<sub>s</sub>, para calcular as curva características das bombas requeridas para um dado diâmetro nominal e interno do duto. O referido procedimento é apresentado a seguir (MATTOS e FALCO, 1998).

Tabela 5.8a: Resultados do dimensionamento otimizado do duto de petróleo para diferentes vazões de projeto.

Vazão de projeto	bbl/d	201,000	240,000	280,000	320,000	360,000	400,000
Refino	bbl/d	200,000	200,000	200,000	200,000	200,000	200,000
QUAI	LIDADE DA MIST	TURA DE PETRO	ÓLEOS ÓTIM	A			
	A	0.9838	0.9838	0.9838	0.9838	0.9838	0.9838
Composição volumétrica da mistura de petróleo ótima	В	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Composição volumetrica da mistura de petroleo otima	C	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	D	0.1621	0.1621	0.1621	0.1621	0.1621	0.1621
Densidade relativa 60°F/60°F		0.9138	0.9138	0.9138	0.9138	0.9138	0.9138
Viscosidade cinemática a 25°C	cSt	80.35	80.35	80.35	80.35	80.35	80.35
Número de acidez total do óleo cru	mgKOH/g	0.59	0.59	0.59	0.59	0.59	0.59
Número de acidez total do corte Diesel leve e pesado	mgKOH/g	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84	0.84
Teor de enxofre no corte Diesel leve e pesado	%m	0.5300	0.5300	0.5300	0.5300	0.5300	0.5300
Rendimento de Gás Combustível	%vol	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
Rendimento de Nafta	%vol	12.3	12.3	12.3	12.3	12.3	12.3
Rendimento de Querosene	%vol	8.1	8.1	8.1	8.1	8.1	8.1
Rendimento de Diesel leve e pesado	%vol	27.3	27.3	27.3	27.3	27.3	27.3
Rendimento de Gasóleo de vácuo	%vol	24.8	24.8	24.8	24.8	24.8	24.8
Rendimento de Resíduo de vácuo	%vol	26.4	26.4	26.4	26.4	26.4	26.4
Rendimento de Resíduo atmosférico	%vol	51.2	51.2	51.2	51.2	51.2	51.2
	PROJETO DO	TRECHO DE SU	CÇÃO				
Diferença de cota entre o tanque de envio e a bomba	ft	65.6	65.6	65.6	65.6	65.6	65.6
Extensão do trecho de sucção	ft	2,296.6	2,296.6	2,296.6	2,296.6	2,296.6	2,296.6
Diâmetro nominal do tubo	in	30.000	30.000	32.000	34.000	34.000	36
Espessura de parede	in	0.281	0.281	0.281	0.281	0.281	0.281
Diâmetro interno do tubo	in	29.438	29.438	31.438	33.438	33.438	35.438
Grau de Resistência		В	В	В	В	В	В
nível de pressão PSL		PSL1	PSL1	PSL1	PSL1	PSL1	PSL1
Fator de atrito	f	0.0330	0.0315	0.0308	0.0302	0.0293	0.0289
Número de Reynolds	Re	7,820	9,338	10,201	10,961	12,331	12,928
Perda de carga do trecho de sucção	ft de água	4.4	6.0	5.7	5.4	6.7	6.1
Pressão máxima de projeto	psig	53.1	53.1	53.1	53.1	53.1	53.1

Tabela 5.8b: Resultados do dimensionamento otimizado do duto de petróleo para diferentes vazões de projeto.

Tabela 5.8b: Resultados do dimensionamento otimizado do duto de petróleo para diferentes vazões de projeto.									
	PROJETO DO TRECHO DE DESCARGA								
Diferença de cota entre os tanques de envio e recebedor	ft	1,640.4	1,640.4	1,640.4	1,640.4	1,640.4	1,640.4		
Extensão do trecho de descarga	ft	328,084.0	328,084.0	328,084.0	328,084.0	328,084.0	328,084.0		
Diâmetro nominal do tubo	in	30.000	32.000	34.000	34.000	36.000	36.000		
Espessura de parede	in	0.281	0.281	0.281	0.281	0.281	0.312		
Diâmetro interno do tubo	in	29.438	31.438	33.438	33.438	35.438	35.376		
Grau de Resistência		X46	X60	X70	X80	X80	X80		
nível de pressão PSL		PSL2	PSL2	PSL2	PSL2	PSL2	PSL2		
Fator de atrito	f	0.0330	0.0321	0.0313	0.0302	0.0297	0.0289		
Número de Reynolds	Re	7,820	8,744	9,591	10,961	11,635	12,951		
Perda de carga do trecho de descarga	ft de água	525.3	523.2	510.5	643.7	600.0	727.0		
Pressão típica de projeto	psig	919.0	918.2	913.1	965.9	948.6	998.8		
Pressão máxima de projeto	psig	1,168.8	1,193.7	1,212.9	1,279.0	1,282.1	1,355.0		
PROJETO DAS BOMBAS NA CONDIÇÃO DE PERFORMANCE COM ÁGUA									
Vazão na condição BEP	gal/min	5,862.5	7,000.0	8,166.7	9,333.3	10,500.0	11,666.7		
	Bomba #1	818.1	817.5	812.4	850.6	834.4	880.2		
Head na condição de BEP [ft]	Bomba #2	818.1	817.5	812.4	850.6	834.4	880.2		
	Bomba #3	409.1	408.7	406.2	425.3	417.2	440.1		
	Bomba #1	1.02	1.21	1.40	1.67	1.80	2.11		
Potência na condição BEP [MW]	Bomba #2	1.02	1.21	1.40	1.67	1.80	2.11		
	Bomba #3	0.51	0.61	0.70	0.89	0.90	1.06		
	Bomba #1	88.74	88.96	89.10	89.34	91.67	91.62		
Eficiência na condição BEP [%]	Bomba #2	88.74	88.96	89.10	89.34	91.67	91.62		
	Bomba #3	88.74	88.96	89.10	89.34	91.67	91.62		
PROJETO DAS B	OMBAS NA CONDIC	ÇÃO DE PERFO	RMANCE CC	M PETRÓLE	)				
Vazão na condição BEP	gal/min	5,862.5	7,000.0	8,166.7	9,333.3	10,500.0	11,666.7		
	Bomba #1	801.5	801.3	796.5	845.1	829.6	875.8		
Head na condição de BEP [ft]	Bomba #2	801.5	801.3	796.5	845.1	829.6	875.8		
	Bomba #3	400.7	400.6	398.3	422.6	414.8	437.9		
	Bomba #1	1.14	1.35	1.55	1.84	1.97	2.30		
Potência na condição BEP [MW]	Bomba #2	1.14	1.35	1.55	1.84	1.97	2.30		
	Bomba #3	0.57	0.67	0.78	0.92	0.99	1.15		

Tabela 5.8c: Resultados do dimensionamento otimizado do duto de petróleo para diferentes vazões de projeto.									
	PROJETO DE TERMINAL NA REFINARIA								
Estoque mínimo na refinaria	bbl	623,517	476,167	439,095	411,292	389,667	372,367		
Estoque médio na refinaria	bbl	779,217	631,867	594,795	566,992	545,367	528,067		
Tempo de preparo de tanque	h	63.2	57.1	52.7	49.4	46.8	44.7		
Tempo de recuperação de estoque	h	2,400	60	30	20	15	12		
CUSTO DE CAPITAL									
Custo de aquisição e instalação das bombas	USD milhões	3.312	3.523	3.707	3.974	4.102	4.371		
Custo de aquisição e instalação dos tubos - trecho sucção	USD milhões	0.078	0.078	0.083	0.088	0.088	0.093		
Custo de aquisição e instalação dos tubos - trecho descarga	USD milhões	20.732	23.688	25.515	25.846	27.382	30.453		
Custo de Mão de obra - duto	USD milhões	22.320	25.048	27.946	27.946	31.015	31.015		
Custo Miscelânea - duto	USD milhões	16.240	17.286	18.332	18.332	19.378	19.378		
Custo de Licenciamento (Rigth of way)	USD milhões	2.966	3.038	3.110	3.110	3.181	3.181		
Custo de construção de tanques - Terminal	USD milhões	166.873	166.873	166.873	166.873	166.873	166.873		
Custo de construção de tanques - Refinaria	USD milhões	142.741	142.741	142.741	142.741	142.741	142.741		
	CUSTO O	PERACIONAL							
Tempo de vida do projeto	anos	30	30	30	30	30	30		
Custo operacional total	USD milhões	864.000	864.000	864.000	864.000	864.000	864.000		
Custo de energia consumida pelas bombas	USD milhões	80.545	75.832	74.812	77.665	73.976	77.728		
Tempo útil de bombeio	h	250,746	210,000	180,000	157,500	140,000	126,000		
Horas disponíveis de bombeio horo-sazonal	h	22,500	22,500	22,500	22,500	22,500	22,500		
Horas disponíveis de bombeio normal	h	229,500	229,500	229,500	229,500	229,500	229,500		
	CUSTO DE MANU	TENÇÃO DE E	STOQUE						
Custo de estoque no Terminal	USD milhões	155.828	155.828	155.828	155.828	155.828	155.828		
Custo de estoque no Duto	USD milhões	34.894	39.797	45.021	45.021	50.568	50.391		
Custo de estoque no Refinaria	USD milhões	98.446	79.830	75.147	71.634	68.902	66.716		
	RENDA BRUT	A DEVIDO RE	FINO						
Cotação da Mistura de petróleo	USD/bbl	60.23	60.23	60.23	60.23	60.23	60.23		
Venda total de produtos	USD/bbl	79.54	79.54	79.54	79.54	79.54	79.54		
Renda bruta de refino	USD milhões	40,541.774	40,541.774	40,541.774	40,541.774	40,541.774	40,541.774		
Despesas totais	USD milhões	1,608.975	1,597.560	1,603.114	1,603.059	1,608.033	1,612.768		
Lucro	USD milhões	38,932.799	38,944.214	38,938.660	38,938.715	38,933.741	38,929.006		

Dado a vazão de projeto Q, a viscosidade cinemática Visc, a densidade relativa Dens, arbitra-se um tubo com diâmetro nominal DN e diâmetro interno DI, construído com aço de grau de resistência e classe de pressão GR

$$v = \frac{4Q}{\pi DI^2} \tag{5.30}$$

se  $v \le v_{max}$  prossegue cálculo, senão busca-se outra especificação de tubo. Para o presente exemplo,  $v_{max, suc} = 6.0$  ft/s e  $v_{max, d} = 8.0$  ft/s.

$$Re = \frac{vD}{Visc} \tag{5.31}$$

Para calcular o fator de atrito (*f*), utiliza-se o equação de Colebrook, por meio do Método de Newton-Raphson (LUDWIG, 1999):

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -\log_{10}\left(\frac{\varepsilon}{3,7DI} + \frac{2,51}{\operatorname{Re}\sqrt{f}}\right) \tag{5.32}$$

onde  $\not$ e a rugosidade absoluta, assumida para o pr esente caso  $\varepsilon = 3,0.10^{-6}$  m (STUCKENBRUCK, 2009). A perda de carga do sistema é dada por:

$$h_{suc} = \left[\sum_{i} k_{suc,i} + f_{suc} \left(\sum_{j} Leq_{suc,j} + L_{suc}\right)\right] \frac{v_{suc}^{2}}{2g}$$
(5.33)

$$h_d = \left[\sum_{i} k_{d,i} + f_d \left(\sum_{j} Leq_{d,j} + L_d\right)\right] \frac{v_d^2}{2g}$$
(5.34)

$$h_{total} = (h_{suc} + h_b + \Delta z) \cdot Dens$$
 em ft de água (5.35)

Para altas perdas de cargas é tecnicamente interessante empregar bombas centrífugas multiestágios e, portanto:

$$h_e = \frac{h_{total}}{N_{estagios}} \tag{5.36}$$

A velocidade específica Ns é dada por (MATTOS e FALCO, 1998):

$$N_{s} = \frac{N\sqrt{Q}}{h_{e}^{3/4}} \tag{5.37}$$

onde N é a rotação da bomba em rpm; Q é a vazão em gal/min e  $h_e$  é a perda de carga por estágio em ft de água.

O procedimento de Karassik descrito por MATTOS e FALCO (1998) recorre a três gráficos para estimar as curvas características das bombas centrífugas. Estes três gráficos foram transcritos em forma de equações e são apresentados no Anexo J.

Deve-se lembrar que toda curva caracteristica representa o desempenho da bomba, quando esta opera com água a temperatura ambiente. O desempenho de qualquer bomba será diferente quando esta trabalha com fluidos mais viscosos e de menor densidade relativa do que a água, como no caso do petróleo crú e combustíveis em geral. LUDWIG (1999) cita o procedimento de correção de desempenho de bombas devido a fluidos viscosos, utilizando um ábaco do Hydraulic Institute. O ábaco de correção de viscosidade foi transcrito na forma de equações, as quais encontram-se registrados no Anexo K.

As Figuras 5.3 a 5.8 dispõem as curvas características das bombas dimensionadas para os diferentes projetos de vazão mostrados nas Tabelas 5.8a-c. Vazões de projeto maiores acarretam o dimensionamento de bombas mais potentes e que atendem com maior folga a demanda da refinaria por petróleo.

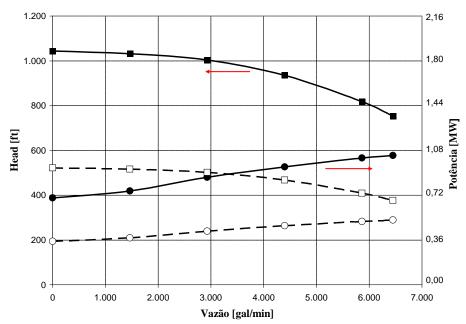


Figura 5-3: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 201 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente.

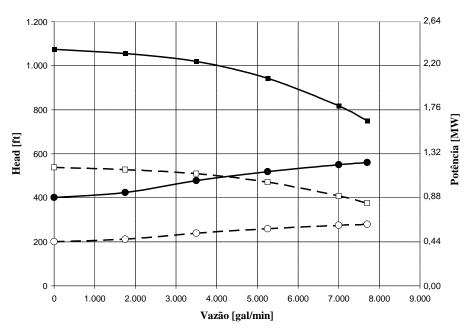


Figura 5-4: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 240 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente .

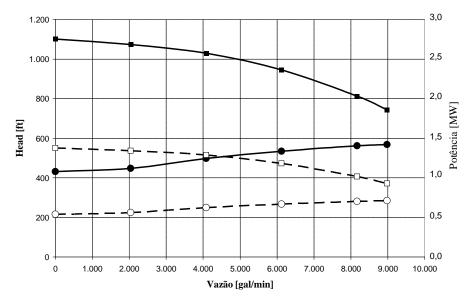


Figura 5-5: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 280 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente .

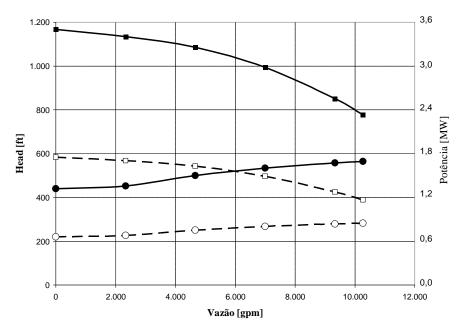


Figura 5-6: Curva de performance das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 320 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente .

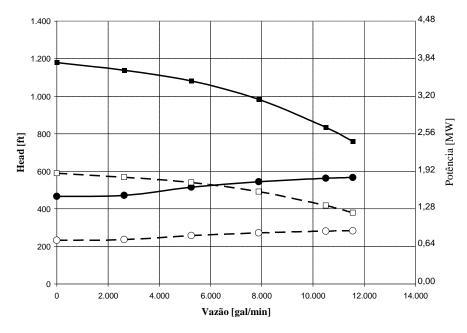


Figura 5-7: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 360 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente .

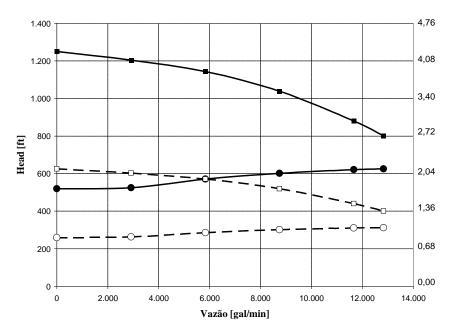


Figura 5-8: Curva de desempenho das bombas dimensionadas para vazão de projeto de 400 mil bpd. Símbolos (■) e (●) denotam as curvas de head e de potência para bombas #1 e #2 (elas são idênticas), respectivamente; (□) e (○) denotam as curvas de head e de potência para bomba #3, respectivamente .

A folga proporcionada por um duto de maior vazão permite que ele não fique operando todo o tempo disponivel, reduzindo o custo total de energia elétrica consumida. Além disso, quando ocorrem interrupções imprevistas de suprimento, o risco de reduzir o refino é minimizado.

Segundo a visão tradicional de dimensionamento de projetos, dentre os seis projetos mostrados nas Tabela 5.8a-c, aquele que proporciona maior lucro é o calculado com Q=240 mil bpd. Como pode ser observado na Tabela 5.8c, este é o projeto com maior lucro acumulado em 30 anos dentre os seis, de USD 38,944 bilhões. A escolha deve-se ao *trade off* entre capital investido em infraestrutura (duto, bombas, tanques), custo operacional (energia elétrica, manutenção), despesas de estocagem e a renda bruta da mistura de petróleo bombeada.

Deve-se salientar que somente é possível afirmar que o projeto Q=240 mil bpd é o melhor dentre os outros cinco, quando todas as varíáveis de entrada e parâmetros do modelo permanecem constantes ou muito próximos dos valores considerados na solução ótima. É possível que soluções ótimas, em condições de varíáveis de entrada desfavoráveis, tenham um desempenho muito pior do que outras soluções subótimas, principalmente quando o ganho um em relação a algum outro não é proporcionalmente significativo.

De maneira análoga à efetuada no Capítulo 4, pode-se avaliar a grau de imunidade de cada projeto diante de cenários de incertezas, valendo-se do conceito de robustez e oportunidade, discutidos anteriormente no Capítulo 2. Para realizar a referida avaliação, serão adotadas as seguintes hipóteses e valores para as variáveis sujeitas a incertezas:

- Custo operacional permanece constante durante os 30 anos de operação do duto;
- O cálculo da condição média representa bem a operação do duto;
- Os desempenhos do duto, das bombas e da refinaria permanecem inalterados ao longo do tempo, pois todas as manutenções necessárias são realizadas dentro dos 15 dias de parada em cada ano;
- As restrições são vigentes durante todo o período de operação;
- Itens de qualidade do petróleo, tais como densidade, viscosidade cinemática e rendimentos, permanecem inalterados durante o tempo de vida do projeto;
- O mercado que é abastecido pela refinaria pode absorver qualquer quantidade dos derivados produzidos. A refinaria não é obrigada a atender totalmente a demanda do mercado, de forma que o processamento de petróleo não acompanhará o crescimento da economia esperado para os próximos 30 anos; ou seja, a demanda é constante;
- Admite-se que há incertezas nas cotações futuras de petróleos e do preço de venda dos derivados produzidos, cuja faixa de variação encontra-se na Tabela 5.9.

Tabela 5.9: Faixa de variação das cotações e spreads dos petróleos A, B, C e D. Igualmente é apresentado a receita bruta advinda por cada corte de petróleo.

Petróleo	Spr	ead (US\$/bbl)			
retroieo	Mínimo	Máximo			
Brent datado	6	110,00			
Petróleo A	-1	6,80	-11,20		
Petróleo B	-	9,60	-5,60		
Petróleo C	-1	7,40	-11,60		
Petróleo D		0,10	1,20		
Cortes do petróleo	Receita Bruta (US\$/bbl)				
Cortes do petroleo	Mínimo	Máximo			
GLP	4	7,20	82,60		
Nafta	6	0,54	105,95		
Querosene	6	9,60	121,80		
Diesel leve+pesado	7	0,40	123,20		
Gasóleo de vácuo	6	7,70	118,48		
Resíduo de vácuo	5	3,04	92,82		

Diferentes cotações de petróleos e de receita bruta dos cortes de petróleo fazem com que diferentes misturas que maximizam a renda bruta do projeto. Observa-se na Tabela 5.8a que, independente do projeto, a mistura de petróleo ótima é sempre a mesma para os preços de produtos e matérias-primas da Tabela 5.7, que foram utilizados nas simulações. Misturas de petróleo diferentes possuem viscosidade cinemática e densidade diferentes daquelas empregadas na concepção do projeto original do duto e, portanto, o desempenho de vazão é impactado por esta nova condição.

O presente estudo de caso propõe conhecer a extensão do impacto das incertezas de variáveis de entrada e predizer qual a melhor opção para aumentar a imunidade da decisão tomada a elas. O primeiro passo consiste em predizer o desempenho das bombas projetadas para a gama de mistura de petróleos factíveis por meio do procedimento de correção das curvas características devido viscosidade, citado no Anexo K. Foi criado um algoritmo em FORTRAN que gerou uma grade experimental igualmente espaçada de composições ternárias de misturas de petróleo A, B, C e D, cujo desempenho no duto e financeiramente foi simulado para cada composição existente na referida grade. Os resultados obtidos de desempenho do projeto de duto Q = 201 mil bpd para composições factíveis da drade experimental podem ser vistos no Apêndice VII. Composições que não atendiam as restrições vigentes do sistema, expressas pelas Equações (5.12) a (5.17), foram deixadas de lado e algoritmo proseguia para a próxima composição a ser visitada.

Os possíveis desempenhos de cada um dos 6 projetos de dutos foi avaliado para cenários compostos por combinações dos valores mínimos e máximos das cotações, spreads e receita bruta mostrados na Tabela 5.9. O número de possibilidades geradas pela combinação de incertezas do petróleo que será bombeado e da renda bruta que será ganho pelo refinador é imensa. Verifica-se no Apêndice VII que a grade experimental de composições de misturas ternárias é composta por 162 composições que atendem as restrições impostas pelas Equações (5.12) a (5.17). Na Tabela 5.9, há 4 petróleos e cada petróleo possui 4 níveis de cotações; para cada um dos 6 cortes de petróleos há a receita bruta mínima e máxima, ou seja, 2 valores. Portanto, o número de possibilidades para cada projeto é igual a 162 x 4<sup>4</sup> x 2<sup>6</sup> = 2.654.208.

Dentre as 2.654.208 possibilidades, existem o pior cenário e o cenário dos sonhos, cujos detalhes estão listados nas Tabela 5.10 e 5.11, respectivamente. Analisando ambos os cenários, percebe-se claramente que o projeto de duto com vazão

Tabela 5.10: Desempenho dos seis projetos diante do pior cenário dentre a faixa de incerteza acerca do mistura de petróleo que será bombeada e cenário de preços médios para os próximos 30 anos.

mistura de petróleo que será bombeada e cenário de preços médios para os próximos 30 anos.								
Projeto [mil bpd]	201	240	280	320	360	400		
Lucro [US\$ millhões]	-90,043	-90,041	-90,049	-90,044	-90,056	-90,055		
Petróleo A	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
Petróleo B	0.61	0.61	0.61	0.61	0.61	0.61		
Petróleo C	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04		
Petróleo D	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35		
Densidade relativa 60°F/60°F	0.88	0.88	0.88	0.88	0.88	0.88		
Visc.cinemática a 25° [cSt]	31.44	31.44	31.44	31.44	31.44	31.44		
Índice de Acidez total Petróleo cru	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01		
[mgKOH/g]	0.91	0.91	0.91	0.91	0.91	0.91		
Índice de Acidez total Diesel Pesado	1.05		1.07	1.25	1.05	1.25		
[mgKOH/g]	1.35	1.35	1.35	1.35	1.35	1.35		
Rendimento DLP [%vol]	32.52	32.52	32.52	32.52	32.52	32.52		
Teor de Enxofre DLP [%m]	0.37	0.37	0.37	0.37	0.37	0.37		
Rendimento GC [%vol]	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00		
Rendimento NFT [%vol]	17.00	17.00	17.00	17.00	17.00	17.00		
Rendimento QRS [%vol]	9.11	9.11	9.11	9.11	9.11	9.11		
Rendimento GO [%vol]	21.24	21.24	21.24	21.24	21.24	21.24		
Rendimento RV [%vol]	19.14	19.14	19.14	19.14	19.14	19.14		
Rendimento RAT [%vol]	40.38	40.38	40.38	40.38	40.38	40.38		
Vazào real [gpm]	6,480.14	7,729.88	9,009.23	10,233.29	11,497.28	12,783.04		
Head real [ft]	1,909.52	1,909.83	1,899.49	2,006.31	1,970.92	2,077.75		
Pressão de descarga [psi]	878.39	877.87	873.48	919.90	904.06	950.55		
Potência bombas #1 e #2 [MW]	1.10	1.29	1.49	1.76	1.89	2.21		
Potência bomba #3 [MW]	0.52	0.62	0.72	0.85	0.91	1.07		
Tempo de preparo [h]	59.64	54.20	50.20	47.30	44.96	43.05		
Tempo de recuperação [h]	108.22	36.91	22.04	15.91	12.36	10.07		
Estoque mínimo [bbl]	530,455	451,664	418,293	394,176	374,661	358,769		
Estoque médio [bbl]	686,155	607,364	573,993	549,876	530,361	514,469		
-								
Tempo útil de bombeio [h]	226,847	190,171	163,166	143,649	127,856	114,996		
Custo de Energia consumida [US\$ milhões]	65.998	65.394	64.530	67.426	64.196	67.549		
Custo de Estoque Refinaria [US\$ millhões]	153.338	135.731	128.273	122.883	118.522	114.971		
Custo de Estoque Terminal [US\$ millhões]	354.386	354.386	354.386	354.386	354.386	354.386		
Custo de Estoque Duto [US\$ millhões]	61.722	70.394	79.635	79.635	89.446	89.134		
Receita Bruta/bbl [US\$/bbl]	64.52	64.52	64.52	64.52	64.52	64.52		
Renda Bruta total [US\$ millhões]	-88,234.5	-88,234.5	-88,234.5	-88,234.5	-88,234.5	-88,234.5		
Cotação do Brent [US\$/bbl]	110.00	110.00	110.00	110.00	110.00	110.00		
Spread do petróleo A [US\$/bbl]	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80		
Spread do petróleo B [US\$/bbl]	-5.60	-5.60	-5.60	-5.60	-5.60	-5.60		
Spread do petróleo C [US\$/bbl]	-11.60	-11.60	-11.60	-11.60	-11.60	-11.60		
Spread do petróleo D [US\$/bbl]	1.20	1.20	1.20	1.20	1.20	1.20		
Receita do corte GC [US\$/bbl]	47.20	47.20	47.20	47.20	47.20	47.20		
Receita do corte Nafta [US\$/bbl]	60.54	60.54	60.54	60.54	60.54	60.54		
Receita do corte Querosene [US\$/bbl]	69.60	69.60	69.60	69.60	69.60	69.60		
Receita do corte Diesel [US\$/bbl]	70.40	70.40	70.40	70.40	70.40	70.40		
Receita do corte GOV [US\$/bbl]	67.70	67.70	67.70	67.70	67.70	67.70		
Receita do corte RV [US\$/bbl]	53.04	53.04	53.04	53.04	53.04	53.04		
Teecha do concir i [Oba/Obij	33.04	33.04	33.04	33.04	33.04	33.04		

Tabela 5.11: Desempenho dos seis projetos diante do cenário dos sonhos dentre a faixa de incerteza acerca do mistura de petróleo que será hombeada e cenário de precos médios para os próximos 30 anos

acerca do mistura de petróleo que será b	acerca do mistura de petróleo que será bombeada e cenário de preços médios para os próximos 30 anos.							
Projeto [mil bpd]	201	240	280	320	360	400		
Lucro [US\$ millhões]	140,827.1	140,828.5	140,822.0	140,823.7	140,815.8	140,814.1		
Petróleo A	0.90	0.90	0.90	0.90	0.90	0.90		
Petróleo B	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
Petróleo C	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08		
Petróleo D	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02		
Densidade relativa 60°F/60°F	0.9158	0.9158	0.9158	0.9158	0.9158	0.9158		
Visc.cinemática a 25° [cSt]	90.02	90.02	90.02	90.02	90.02	90.02		
Índice de Acidez total Petróleo cru [mgKOH/g]	0.76	0.76	0.76	0.76	0.76	0.76		
Índice de Acidez total Diesel Pesado								
[mgKOH/g]	1.18	1.18	1.18	1.18	1.18	1.18		
Rendimento DLP [%vol]	27.08	27.08	27.08	27.08	27.08	27.08		
Teor de Enxofre DLP [%m]	0.53	0.53	0.53	0.53	0.53	0.53		
Rendimento GC [%vol]	1.04	1.04	1.04	1.04	1.04	1.04		
Rendimento NFT [%vol]	11.89	11.89	11.89	11.89	11.89	11.89		
Rendimento QRS [% vol]	7.90	7.90	7.90	7.90	7.90	7.90		
Rendimento GO [%vol]	25.19	25.19	25.19	25.19	25.19	25.19		
Rendimento RV [%vol]	26.89	26.89	26.89	26.89	26.89	26.89		
Rendimento RAT [% vol]	52.09	52.09	52.09	52.09	52.09	52.09		
Vazào real [gpm]	6,013.36	7,195.18	8,412.36	9,525.24	10,739.25	11,912.27		
Head real [ft]	2,045.67	2,046.90	2,035.85	2,157.44	2,118.08	2,239.74		
Pressão de descarga [psi]	937.10	936.89	932.20	985.05	967.42	1,020.38		
Potência bombas #1 e #2 [MW]	1.14	1.35	1.55	1.84	1.97	2.30		
Potência bomba #3 [MW]	0.51	0.61	0.70	0.84	0.90	1.06		
Tempo de preparo [h]	62.25	56.30	51.91	48.88	46.30	44.30		
Tempo de recuperação [h]	388.83	51.40	27.14	18.96	14.27	11.52		
Estoque mínimo [bbl]	600,227	469,127	432,599	407,371	385,813	369,157		
Estoque médio [bbl]	755,927	624,827	588,299	563,071	541,513	524,857		
Tempo útil de bombeio [h]	244,456	204,303	174,743	154,327	136,881	123,402		
Custo de Energia consumida [US\$ milhões]	75.90	72.39	71.31	74.63	70.95	74.71		
Custo de Estoque Refinaria [US\$ millhões]	68.96	57.00	53.67	51.37	49.40	47.88		
Custo de Estoque Terminal [US\$ millhões]	144.66	144.66	144.66	144.66	144.66	144.66		
Custo de Estoque em Duto [US\$ millhões]	25.20	28.73	32.51	32.51	36.51	36.38		
Cotação do Petróleo [US\$/bbl]	43.49	43.49	43.49	43.49	43.49	43.49		
Receita Bruta/bbl [US\$/bbl]	111.25	111.25	111.25	111.25	111.25	111.25		
Renda Bruta total [US\$ millhões]	142,305	142,305	142,305	142,305	142,305	142,305		
Cotação do Brent [US\$/bbl]	60.00	60.00	60.00	60.00	60.00	60.00		
Spread do petróleo A [US\$/bbl]	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80		
Spread do petróleo B [US\$/bbl]	-9.60	-5.60	-5.60	-5.60	-5.60	-5.60		
Spread do petróleo C [US\$/bbl]	-17.40	-17.40	-17.40	-17.40	-17.40	-17.40		
Spread do petróleo D [US\$/bbl]	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10		
Receita do corte GC [US\$/bbl]	82.60	82.60	82.60	82.60	82.60	82.60		
Receita do corte Nafta [US\$/bbl]	105.95	105.95	105.95	105.95	105.95	105.95		
Receita do corte Querosene [US\$/bbl]	121.80	121.80	121.80	121.80	121.80	121.80		
Receita do corte Diesel [US\$/bbl]	123.20	123.20	123.20	123.20	123.20	123.20		
Receita do corte GOV [US\$/bbl]	118.48	118.48	118.48	118.48	118.48	118.48		
Receita do corte RV [US\$/bbl]	92.82	92.82	92.82	92.82	92.82	92.82		
receiu do corte re i [Obd/Oor]	72.02	72.02	72.02	72.02	72.02	72.02		

nominal de 240 mil bpd é o que apresenta maior lucro dentre os 6 projetos possíveis, o que demonstra que este projeto é robusto para qualquer situação contida na faixa de incerteza avaliada. Este fato pode ser explicado comparando-se as ordens de grandeza das duas parcelas que formam o lucro: a margem bruta e os custos totais. A margem bruta acumulada no período de 30 anos de operação são de US\$ –88,234 e 142,305 bilhões, respectivamente para o pior cenário e o cenário dos sonhos. Por outro lado, os custos totais do período estão na faixa de US\$ 1,806-1,821 e US\$ 1,477-1,491 bilhões, respectivamente para o pior cenário e o cenário dos sonhos; ou seja, os custos totais são cerca de 1 a 2% do montante total. Portanto, a variável mais impactante sobre o lucro é a composição da mistura de petróleo processado.

Quanto maior a margem bruta, ou seja, matéria-prima deve ser a mais barata e a receita bruta advinda de seus produtos seja a maior possível. Qualquer variável do modelo que restrinja o processamento e/ou a movimentação da mistura ótima de petróleo para cada cenário de preço deve afetar enormemente o resultado financeiro do projeto escolhido. Como no presente caso, todos os 6 projetos permitem um bom desempenho para as misturas ótimas (vide Apêndice VII), o melhor projeto será aquele que apresentar menor custo total.

Nota-se nas Tabelas 5.10 e 5.11 que mesmo se dobrássemos a tarifa normal da energia de US\$ 101,82/MWh para US\$ 203,64/MWh, o custo de consumo de cada um 6 projetos provocaria um efeito insignificante sobre o lucro dos projetos.

Com o intuito de provar a importância da avaliação das incertezas paramétricas, foi simulado novamente os mesmos 6 projetos possíveis, porém considerando que há incerteza nos parâmetros a e b da equação K.3 (Anexo K) utilizada para corrigir a performance do sistema bomba/duto para fluidos viscosos. Este cenário representa que o desempenho da bomba torna-se mais sensível à viscosidade do fluido bombeado, pois este exercerá maior resistência ao escoamento.

$$z = a.\ln(v) + 2,02479641 - b.y \tag{5.38}$$

onde a = 1,2476 e b = 0,4988 são os valores exatos dos parâmetros. Supondo-se que a incerteza de cada está delimitada pelos intervalos:

$$a \in \Re$$
,  $a \in [0,4990; 1,9961]$   $b \in \Re$ ,  $b \in [0,1995; 0,7981]$ 

A condição mais desfavorável para as bombas ocorre com a=1,9961 e b=0,1995, em que estas são passíveis de sofrerem uma perda mais acentuada de eficiência

ao trabalharem com petróleos viscosos. Os resultados das simulações são mostrados nas Tabelas 5.12 e 5.13.

Tabela 5.12: Desempenho dos seis projetos diante do pior cenário dentre a faixa de incerteza acerca do mistura de petróleo que será bombeada, cenário de preços médios para os próximos 30 anos e incerteza de dois parametros da Equação (5.38).

dois parametros da Equação (5.38).							
Projeto [mil bpd]	201	240	280	320	360	400	
Lucro [US\$ millhões]	-90,064.92	-90,046.75	-90,053.58	-90,048.00	-90,058.08	-90,057.78	
Petróleo A	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
Petróleo B	0.61	0.61	0.61	0.61	0.61	0.61	
Petróleo C	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	
Petróleo D	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	0.35	
Densidade relativa 60°F/60°F	0.88	0.88	0.88	0.88	0.88	0.88	
Visc.cinemática a 25° [cSt]	31.44	31.44	31.44	31.44	31.44	31.44	
Índice de Acidez total Petróleo cru [mgKOH/g]	0.91	0.91	0.91	0.91	0.91	0.91	
Índice de Acidez total Diesel Pesado [mgKOH/g]	1.35	1.35	1.35	1.35	1.35	1.35	
Rendimento DLP [%vol]	32.52	32.52	32.52	32.52	32.52	32.52	
Teor de Enxofre DLP [%m]	0.37	0.37	0.37	0.37	0.37	0.37	
Rendimento GC [%vol]	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	
Rendimento NFT [%vol]	17.00	17.00	17.00	17.00	17.00	17.00	
Rendimento QRS [%vol]	9.11	9.11	9.11	9.11	9.11	9.11	
Rendimento GO [% vol]	21.24	21.24	21.24	21.24	21.24	21.24	
Rendimento RV [%vol]	19.14	19.14	19.14	19.14	19.14	19.14	
Rendimento RAT [%vol]	40.38	40.38	40.38	40.38	40.38	40.38	
Vazào real [gpm]	5,836.29	7,000.85	8,195.34	9,362.44	10,543.74	11,785.58	
Head real [ft]	1,835.70	1,839.46	1,833.48	1,928.34	1,899.84	1,996.31	
Pressão de descarga [psi]	846.72	847.78	845.25	886.45	873.66	915.62	
Potência bombas #1 e #2 [MW]	2.01	2.36	2.70	3.19	3.40	3.95	
Potência bomba #3 [MW]	0.51	0.60	0.70	0.84	0.90	1.06	
Tempo de preparo [h]	63.35	57.14	52.60	49.28	46.67	44.50	
Tempo de recuperação [h]	23,671.47	59.96	29.64	19.84	14.86	11.76	
Estoque mínimo [bbl]	627,605	476,135	438,317	410,687	388,949	370,796	
Estoque médio [bbl]	783,305	631,835	594,017	566,387	544,649	526,496	
Tempo útil de bombeio [h]	251,872	209,975	179,370	157,010	139,419	124,729	
Custo de Energia consumida [US\$	231,672	209,973	179,370	157,010	137,417	124,729	
milhões]	128.64	119.82	117.36	121.28	115.01	119.74	
Custo de Estoque Refinaria [US\$ millhões]	175.05	141.20	132.75	126.57	121.72	117.66	
Custo de Estoque Terminal [US\$ millhões]	354.39	354.39	354.39	354.39	354.39	354.39	
Custo de Estoque Duto [US\$ millhões]	61.72	70.39	79.64	79.64	89.45	89.13	
Cotação do Petróleo [US\$/bbl]	106.54	106.54	106.54	106.54	106.54	106.54	
Receita Bruta/bbl [US\$/bbl]	64.52	64.52	64.52	64.52	64.52	64.52	
Renda Bruta total [US\$ millhões]	-88,234.50	-88,234.50	-88,234.50	-88,234.50	-88,234.50	-88,234.50	
Cotação do Brent [US\$/bbl]	110.00	110.00	110.00	110.00	110.00	110.00	
Spread do petróleo A [US\$/bbl]	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	
Spread do petróleo B [US\$/bbl]	-5.60	-5.60	-5.60	-5.60	-5.60	-5.60	
Spread do petróleo C [US\$/bbl]	-11.60	-11.60	-11.60	-11.60	-11.60	-11.60	
Spread do petróleo D [US\$/bbl]	1.20	1.20	1.20	1.20	1.20	1.20	
Receita do corte GC [US\$/bbl]	47.20	47.20	47.20	47.20	47.20	47.20	
Receita do corte Nafta [US\$/bbl]	60.54	60.54	60.54	60.54	60.54	60.54	
Receita do corte Querosene [US\$/bbl]	69.60	69.60	69.60	69.60	69.60	69.60	
Receita do corte Diesel [US\$/bbl]	70.40	70.40	70.40	70.40	70.40	70.40	
Receita do corte GOV [US\$/bbl]	67.70	67.70	67.70	67.70	67.70	67.70	
Receita do corte RV [US\$/bbl]	53.04	53.04	53.04	53.04	53.04	53.04	
recent do corte rev [Obd/001]	33.04	33.04	33.04	JJ.0 <del>1</del>	33.04	33.04	

Tabela 5.13: Desempenho dos seis projetos diante do cenário dos sonhos dentre a faixa de incerteza acerca do mistura de petróleo que será bombeada, cenário de preços médios para os próximos 30 anos e incerteza de dois parametros da da Equação (5.38).

incerteza de dois parametros da da Equação (5.38).								
Projeto [mil bpd]	201	240	280	320	360	400		
Lucro [US\$ millhões]	140,823.9	140,820.3	140,810.7	140,818.4	140,811.3	140,810.4		
Petróleo A	0.90	0.90	0.90	0.90	0.90	0.90		
Petróleo B	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00		
Petróleo C	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08		
Petróleo D	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02		
Densidade relativa 60°F/60°F	0.92	0.92	0.92	0.92	0.92	0.92		
Visc.cinemática a 25° [cSt]	90.02	90.02	90.02	90.02	90.02	90.02		
Índice de Acidez total Petróleo cru	0.76	0.76	0.76	0.76	0.76	0.76		
[mgKOH/g]	0.70	0.70	0.70	0.70	0.70	0.70		
Índice de Acidez total Diesel Pesado [mgKOH/g]	1.18	1.18	1.18	1.18	1.18	1.18		
Rendimento DLP [%vol]	27.08	27.08	27.08	27.08	27.08	27.08		
Teor de Enxofre DLP [%m]	0.53	0.53	0.53	0.53	0.53	0.53		
Rendimento GC [%vol]	1.04	1.04	1.04	1.04	1.04	1.04		
Rendimento NFT [% vol]	11.89	11.89	11.89	11.89	11.89	11.89		
Rendimento QRS [%vol]	7.90	7.90	7.90	7.90	7.90	7.90		
Rendimento GO [%vol]	25.19	25.19	25.19	25.19	25.19	25.19		
Rendimento RV [%vol]			26.89	26.89	26.89	26.89		
	26.89	26.89						
Rendimento RAT [%vol]	52.09	52.09	52.09	52.09	52.09	52.09		
Vazào real [gpm]	4,339.49	5,303.48	6,299.68	7,303.80	8,292.98	9,391.18		
Head real [ft]	1,821.15	1,832.55	1,834.11	1,923.47	1,903.04	1,997.06		
Pressão de descarga [psi]	840.74	845.19	845.89	884.64	875.40	916.23		
Potência bombas #1 e #2 [MW]	14.43	14.93	15.61	16.84	17.11	18.67		
Potência bomba #3 [MW]	0.47	0.57	0.66	0.80	0.87	1.02		
Tempo de preparo [h]	76.23	67.10	60.60	55.84	52.28	49.21		
Tempo de recuperação [h]	-46.86	-132.11	150.10	47.60	28.46	19.67		
Estoque mínimo [bbl]	635,264.22	559,177.76	557,047.70	465,372.76	435,707.25	410,092.93		
Estoque médio [bbl]	790,964.22	714,877.76	712,747.70	621,072.76	591,407.25	565,792.93		
Tempo útil de bombeio [h]	338,749	277,177	233,345	201,265	177,258	156,530		
Custo de Energia consumida [US\$ milhões]	1,272.992	998.184	805.175	743.742	666.632	643.523		
Custo de Estoque Refinaria [US\$	70.154	65 212	<i>65</i> 010	56 656	53.950	51 612		
millhões]	72.154	65.213	65.019	56.656	33.930	51.613		
Custo de Estoque Terminal [US\$	144.662	144.662	144.662	144.662	144.662	144.662		
millhões]								
Custo de Estoque em Duto [US\$ millhões]	25.20	28.73	32.51	32.51	36.51	36.38		
Cotação do Petróleo [US\$/bbl]	43.49	43.49	43.49	43.49	43.49	43.49		
Receita Bruta/bbl [US\$/bbl]	111.25	111.25	111.25	111.25	111.25	111.25		
Renda Bruta total [US\$ millhões]	142,305.16	142,305.16	142,305.16	142,305.16	142,305.16	142,305.16		
Cotação do Brent [US\$/bbl]	60.00	60.00	60.00	60.00	60.00	60.00		
Spread do petróleo A [US\$/bbl]	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80	-16.80		
Spread do petróleo B [US\$/bbl]	-9.60	-9.60	-9.60	-9.60	-9.60	-9.60		
Spread do petróleo C [US\$/bbl]	-17.40	-17.40	-17.40	-17.40	-17.40	-17.40		
Spread do petróleo D [US\$/bbl]	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10		
Receita do corte GC [US\$/bbl]	82.60	82.60	82.60	82.60	82.60	82.60		
	105.95	105.95	105.95	105.95	105.95	105.95		
Receita do corte Nafta [US\$/bbl] Receita do corte Querosene	103.93	103.93	103.93		103.93	103.93		
FT TC & /LL11				121.80				
Receita do corte Diesel [US\$/bbl]	123.20	123.20	123.20	123.20	123.20	123.20		
Receita do corte GOV [US\$/bbl]	118.48	118.48	118.48	118.48	118.48	118.48		
Receita do corte RV [US\$/bbl]	92.82	92.82	92.82	92.82	92.82	92.82		

Os custos totais dos projetos, cujo desempenho foram simulados com incertezas nas equações de correção de viscosidade ficaram na faixa de US\$ 1,812-1,830 e US\$ 1,481-1,494, o que representa um aumento de US\$ 3 a 9 bilhões em relação ao resultados anteriores na faixa de US\$ 1,806-1,821 e US\$ 1,477-1,491 bilhões, respectivamente para o pior cenário e o cenário dos sonhos.

Conclui-se que variações nos parâmetros das equações do modelo provocam resultados significantemente diferentes, podendo em alguns casos fazer com que um projeto ótimo para uma determinada condição não seja suficiente bom em condições adversas.

No presente caso, o projeto de bombas/duto com vazão nominal de 240 mil bpd mostrou-se sempre o melhor em todas as simulações realizadas neste trabalho. Este fato pode ser explicado observando-se as Tabelas 5.8a, 5.10 a 5.13.

#### 5.3 CONCLUSÕES

O referido projeto representa a conciliação do *trade off* de folga entre o tempo requerido e o tempo disponível de utilização do duto; quantidade de petróleo em estoque na refinaria para atender um alto nível de serviço e potência requerida pelas bombas.

Conforme pode ser visto na Tabela 5.8a, todos os projetos foram dimensionados com a mistura binária composta pelos petróleos A = 98,38% vol e B = 16,21% vol, cuja viscosidade cinemática a 25°C é de 80,35 cSt. No caso do pior cenário, mostrado nas Tabelas 5.10 e 5.12, a mistura processada é composta pelos petróleos B = 61,0% vol; C = 4,0% vol e D = 35,0% vol, tendo viscosidade cinemática a 25°C de 31,44 cSt. O péssimo resultado financeiro deste cenário deve-se ao forte processamento do petróleo D, o qual é o mais caro da lista (vide Tabelas 5.7 e 5.9), adquirido na cotação mais alta do intervalo. Pela Tabela 5.6, vê-se que o petróleo D é o de menor viscosidade do grupo e menor teor de enxofre no corte diesel, o que abaixa a viscosidade da mistura. Esta menor viscosidade facilita o escoamento da mistura pelo duto, o que resulta em maior vazão. No caso do projeto com vazão nominal de 240 mil bpd, a vazão do duto aumenta de 7.000 gal/min para 7.730 gal/min (Tabelas 5.8b, 5.10). Todavia a melhoria na vazão não acarreta mudança significativa no resultado final financeiro de cada projeto.

Analisando o cenário dos sonhos, temos de acordo as Tabelas 5.11 e 5.13, que a mistura processada é composta pelos petróleos A = 90,0%vol; C = 8,0%vol e D = 2,0%vol e possui viscosidade cinemática 25°C de 90,02 cSt. A diferença entre a viscosidade de projeto e a do cenário dos sonhos é pequena (aproximadamente 10 cSt), o que significa que o dimensionamento do sistema bombas/duto está numa condição muito próxima da ótima, como pode verificar pelas Tabelas 5.8b e 5.11 que mostram um aumento de 7.000 gal/min para 7.195 gal/min para o projeto com vazão nominal de 240 mil bpd.

Outro ponto importante a ser discutido é a influência das restrições operacionais dadas pelas inequações 5.12-17. Comparando-se os limites das mencionadas inequações com as propriedades físico-químicas das misturas de petróleo de projeto (Tabelas 5.8a-c) e do cenário dos sonhos (Tabelas 5.11 e 5.13), verifica-se que a única restrição atuante é o teor máximo de enxofre no corte diesel igual a 0,5300%m. Esta restrição impede o processamento de misturas de petróleos mais baratas, como por exemplo, o petróleo A atende todas as restrições das inequações 5.12-17, exceto o teor de enxofre (Tabela 5.6), o que poderia gerar um lucro muito maior do que os encontrados aqui.

Conclui-se então que os preços de matérias-primas e de produtos em conjução com as restrições operacionais vigentes para o processo determinam fortemente o dimensionamento ótimo deste estudo de caso. A restrição de teor máximo de enxofre no corte diesel estreita bastante as opções de misturas de petróleos factíveis, restringindo os a uma faixa estreita de viscosidades e o cenário de preços considerados no projeto determina que o resultado dos sonhos seja muito próximo da condição de projeto. Estes fatores levam o projeto 240 mil bpd a ser sempre o melhor comparando-se aos demais, independentemente das grandes incertezas de preços e paramétricas.

É importante perceber em todos os casos que a sensibilidade do lucro às incertezas inerentes ao projeto é sempre muito maior que aquelas associadas às mudanças de vazão (e de bomba) para um cenário estabelecido. Portanto na prática, o problema de dimensionamento da bomba não tem qualquer importância! Por mais absurda que esta afirmação possa parecer, o fato é que as eventuais perdas associadas à escolha equivocada da bomba são desprezíveis frente às incertezas existentes. Sendo assim, a escolha do sistema de bombeamento pode ser regida por critérios estratégicos e logísticos, ao invés de técnicos. Nesse cenário. A escolha de sistemas de bombeamento de alta capacidade podem ser conveniente, mesmo que com algum custo operacional adicional.

#### CAPÍTULO 6

#### CONCLUSÃO E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.

O presente trabalho tratou da influência paramétrica sobre o projeto de equipamentos e processos e permitiu elucidar várias questões relativas aos efeitos que as incertezas paramétricas podem causar sobre os ganhos de uma empreitada. Como foi mostrado no Capítulo 3, a influência das incertezas paramétricas sobre o projeto de processos e equipamentos tem sido negligenciada na maioria dos trabalhos reportados na literatura por causa da dificuldade de delimitar faixas de valores factíveis para muitos parâmetros sem o emprego de cálculos computacionais intensivos.

No Capítulo 4, foi verificada a importância da caracterização da variabilidade dos dados experimentais para minimizar incertezas. De forma geral, quanto maior o número de dados experimentais disponíveis, maior é a quantidade de informação disponível sobre o processo e menores são as incertezas paramétricas e as conseqüentes incertezas de projeto. Foi mostrado que o tipo de distribuição de probabilidades que gera o erro experimental não parece exercer impacto significativo sobre a forma e a amplitude da região de confiança paramétrica, o que aumenta a robustez do trabalho de estimação de parâmetros. Por isso, de forma pragmática os erros experimentais podem ser considerados como normais para fins de determinação da região de confiança paramétrica, quando os conjuntos de dados experimentais são pequenos, como no exemplo apresentado neste capítulo. Quando o conjunto de dados experimentais é grande e apresenta muitas réplicas, a distribuição das incertezas paramétricas segue necessariamente a distribuição normal, como descrito pelo Teorema do Limite Central.

Em todos os casos analisados neste trabalho, o procedimento de reconciliação de dados gerou parâmetros mais precisos e com menores regiões de incerteza paramétrica, quando comparados aos casos em que foi utilizado o procedimento usual de mínimos quadrados ponderados. Desta forma, é recomendável que se use procedimento de reconciliação de dados para reduzir as incertezas paramétricas e de projeto.

O procedimento de delimitação de regiões de confiança paramétricas proposto por SCHWAAB et.~al.~(2008a) foi usado de forma eficiente para avaliar as incertezas paramétricas. O procedimento estabelece uma conexão entre a definição da região de confiança paramétrica e a estimação de parâmetros, fundamentados nos testes estatísticos clássicos, tais como as funções F de Fisher e  $\chi^2$ . Uma grande vantagem deste procedimento é que ele aproveita o esforço computacional realizado pelo método de otimização do enxame de partículas, para buscar os valores ótimos dos parâmetros, para também gerar a região de confiança paramétrica. A partir da informação armazenada pelo procedimento, é também possível desenvolver procedimentos de otimização bastante eficientes, como mostrado nos Capítulos 3 a 5 do presente trabalho.

No Capítulo 5, a avaliação do efeito de incertezas sobre o preço e qualidade do petróleo bombeado por um duto para suprir uma determinada refinaria demonstrou que problemas de dimensionamento com restrições severas podem ser governados por estas restrições. Os resultados mostraram que os diferenciais entre um e outro projeto, em termos da função objetivo lucro, podem ser muito pequenos, de maneira que o lucro pode não ser o único critério utilizado para escolher o melhor projeto. Nesses casos, questões estratégicas e de confiabilidade que demandem algum nível de sobredimensionamento devem ser considerados, com o intuito de absorver os efeitos das incertezas sobre o desempenho do projeto. Em problemas que envolvam aspectos logísticos, é importante garantir que o projeto seja especificado para acomodar paradas não programadas e outros imprevistos, sem que ocorra nenhum impacto indesejável sobre a operação, como por exemplo o desabastecimento do mercado. Além disso, devem ser considerados aspectos intangíveis, tais como a credibilidade da empresa depositada por seus acionistas, clientes, fornecedores, o governo e a sociedade.

Este trabalho demonstrou que as incertezas paramétricas podem ser muito relevantes no processo de dimensionamento de projetos e de forma nenhuma devem ser desprezadas *a priori*, sob o risco do projeto não atender as expectativas da especificação feita pelo projetista. Os resultados obtidos no Capítulo 4 e 5 mostraram que as faixas de lucros esperados para cada projeto possível podem ser bastante amplas, variando de lucros muito superiores ao lucro nominal esperado a enormes prejuízos. O projetista deve estar atento, portanto, a esses efeitos durante a escolha do melhor projeto.

#### 6.1 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Várias propostas podem ser feitas para o desenvolvimento de futuros trabalhos de investigação, relacionados ao tema desta dissertação:

- Explorar a avaliação de trade off entre executar o projeto, a despeito da existência de grandes incertezas paramétricas sobre o assunto, e a possibilidade de adiar a execução do projeto para que sejam feitos mais experimentos ou observações que permitam reduzir as incertezas, empregando o procedimento de delimitação de região de confiança paramétrica, conforme sugerido por PINTO (1998; 2001);
- Incluir no escopo do problema de otimização de dimensionamento de projeto a
  questão das probabilidades de taxa de falhas, de forma que possa ser avaliado o
  custo do sobredimensionamento e o ganho advindo do processo estar menos
  sujeito a falhas;
- Simular o comportamento transiente do processo diante de perturbações durante o dimensionamento, para que o processo seja resiliente e possa retornar à condição normal de operação rapidamente;
- Usar a região de confiança paramétrica como teste de aderência dos valores dos parâmetros do modelo aos dados de processo em aplicações em tempo real (RTO). Caso os resultados não sejam satisfatórios, o sistema de controle do procedimento RTO deve executar a rotina de estimação de parâmetros novamente.
- Estudar o comportamento das funções robustez e oportunidade calculadas pelo algoritmo proposto na Seção 3.8 do Capítulo 3, quando aplicado para modelos que sejam não-lineares em relação aos parâmetros.

#### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ACEVEDO, J., PISTIKOPOULOS, E. N., 1996, "Computational Studies of Stochastic Optimization algorithms for process synthesis under uncertainty", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 20, suppl., pp. S1-S6.

BARD, Y., 1974, *Nonlinear parameter estimation*, 1st ed., New York: Academic Press.

BARROS, S. M. de, 2003, *Tanques de Armazenamento: teoria*, 1 ed., Rio de Janeiro: PETROBRAS. Recursos Humanos. Universidade Corporativa.

BEN-HAIM, Y., 2000, "Robust rationality and decisions under severe uncertainty", *Journal of The Franklin Institute*, vol. 337, pp. 171-199.

BEN-HAIM, Y., 2006, *Info-gap Decision Theory: Decisions under severe uncertainty*, 2nd ed., Oxford: Academic Press.

BERKETA, R., 2010, *Bridges over Niagara Falls*, Disponível em: <a href="http://www.niagarafrontier.com/bridges.html">http://www.niagarafrontier.com/bridges.html</a> Acesso em 09 abr 2010.

BERNARDO, F. P.; SARAIVA, P. M.; PISTIKOPOULOS, E. N., 2003, "Process Design under uncertainty: Robustness criteria and Value of information", In: *Dynamic Model Development: Methods, Theory and Applications – Computer-aided Chemical Engineering, 16*, edited by S. P. Asprey and S. Macchietto (editors), 1<sup>st</sup> ed., Amsterdam: Elsevier Science B.V., pp. 175-208.

BIEGLER, L. T., GROSSMANN, I. E., 2004, "Retrospective on optimization", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 28, pp. 1169-1192.

BOX, G. E. P., LUCAS, H. L., 1959, "Design of experiments in non-linear situations", *Biometrika*, vol. 46, pp. 77-89.

BRANAN, C., 2005, Rules of Thumb for Chemical Engineers: A Manual of quick, accurate solutions to everyday process engineering problems, 4<sup>th</sup> ed., Oxford: Gulf Professional Publishing.

BRASIL, N. I. do, 2002, Sistema Internacional de Unidades: Grandezas físicas e físico-químicas – recomendações das Normas ISO para terminologia e símbolos, 1 ed., Rio de Janeiro: Interciência, pp. 13-16.

- CARBERRY, J. J., 2001, *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*, republicação do trabalho originalmente publicado em 1976 pela McGraw-Hill, Inc. New York. Mineola: Dover Publications Inc., pp. 382.
- CEMIG, COMPANHIA ENERGÉTICA DE MINAS GERAIS, *Tarifas de Energia: Tarifa Azul A1*, Disponível em: <a href="http://www.cemig.com.br/consumidores comerciais/tarifas energia/menu cinza.asp">http://www.cemig.com.br/consumidores comerciais/tarifas energia/menu cinza.asp</a>. Acesso em 02 jul. 2010.
- CHACON-MONTDRAGON, O. L., HIMMELBLAU, D. M., 1996, "Integration of Flexibility and Control in Process Design", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 20, n. 4, pp. 447-452.
- CIRIC, A. R., JIA, T., 1994, "Economic Sensitivity Analysis of waste treatment costs in aource reduction projects: Continuous optimization problems", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 18, n. 6, pp. 481-495.
- CUTLER, C. R., PERRY, R. T., 1983, "Real time optimization with multivariable control is required to maximize profits", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 7, n. 5, pp. 663-667.
- DER KIUREGHIAN, A.; DITLEVSEN, O., 2009, "Aleatory or epistemic? Does it matter?", *Structural Safety*, vol. 31, pp. 105-112.
- DOERING, F. J.; GADDY, J. L., 1979, "Simultaneous overdesign and optimization of chemical processes", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 3, pp. 465-472.
- DNV, DET NORSKE VERITAS, 2010, *Risk a word from ancient Greece*, Disponível em: <a href="http://www.dnv.com/focus/risk\_management/more\_information/risk\_origin/">http://www.dnv.com/focus/risk\_management/more\_information/risk\_origin/</a>. Acesso em: 16 fev 2010.
- DAVID PAI, C. C., HUGHES, R. R., 1987, "Strategies for formulating and solving two-stage problems for process design under uncertainty", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 11, n. 6, pp. 695-706.
- ERTHAL, Neto, C. A., 2006, *Estudo sobre Estoques Mínimos de Refinarias*, PETROBRAS, Relatório em excel.
- FALCO, R. de, 2009, "Estações de Bombeamento e de Compressão", In: *Engenharia de Dutos*, organizado por José Luiz de França Freire, 1 ed., Rio de Janeiro: ABCM Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, pp.8.1-13.
- FULGÊNCIO, P. C., 2007, Glossário Vade Mecum: Administração pública, Ciências Contábeis, Direito, Economia, Meio Ambiente: 14.000 termos e definições, 1 ed., Rio de Janeiro: Mauad Editora, pp.134.
- GARY, J. H., HANDWERK, G. E., KAISER, M. J., 2007, *Petroleum Refining: Technology and Economics*, 5<sup>th</sup> edition, Boca Raton: CRC Press Taylor & Francis Group, LLC.

- GWARTNEY, J. D., STROUP, R.L., SOBEL, R. S., MacPHERSON, D., 2009, *Economics: Private and Public Choice*, 12<sup>th</sup> edition, Mason: South-Western Cengage Learning, pp. 4-14.
- GROSSMANN, I. E., SARGENT, R. W. H., 1979, "Optimum design of multipurpose chemical plants", *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, vol. 18, pp. 343-348.
- GROSSMANN, I. E.; HALEMANE, P.; SWANEY, R. E., 1983, "Optimization strategies for flexible chemical processes", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 7, n. 4, pp. 439-462.
- GROSSMANN, I. E., van den HEEVER, S. A., HARJUNKOSKI, I., 2001, "Discrete optimization methods and their role in the integration of planning and scheduling", *Proceedings of the sixth International Chemical Process Control Meeting (CPC-6)*, Tucson, pp.150-168. Disponível em:
- http://egon.cheme.cmu.edu/Papers/GrossmannVanHHarDiscrete.pdf, Acesso em 25 abr 2011.
- GUILLÉN, G., MELE, F. D., BAGAJEWICZ, M. J., ESPUÑA, A., PUIGJANER, L., 2005, "Multiobjetive supply chain design under uncertainty", *Chemical Engineering Science*, vol. 60, pp. 1535-1553.
- GWILT, J., "Life of Vitruvius", In.: *The architecture of Marcus Vitruvius Pollio in ten books*, translated from the Latin by Josef Gwilt, 1 ed., London: John Weale, 1860, pp. xi-xiii.
- HUME, D., 1739, *Tratado da Natureza Humana: uma tentativa de introduzir o método experimental de raciocínio nos assuntos morais*, tradução de Débora Danowski, 2.ed. rev. e ampliada, São Paulo: Editora UNESP, 2009.
- IERAPETRITOU, M. G., PISTIKOPOULOS, E. N., FLOUDAS, C. A., "Operational planning under uncertainty", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 18, Suppl., pp. S553-S557.
- ISSANCHOU, S., COGNET, P., CABASSUD, M., 2005, "Sequential experimental design strategy for rapid kinetic modeling of chemical synthesis", *AIChe Journal*, vol. 51, n. 6, pp. 1773-1781.
- JAMES, T., 2008, *Energy Markets: Price Risk Management and Trading*, 1<sup>st</sup> ed., Wiley Finance, Singapore: John Wiley & Sons.
- KARUPPIAH, R., GROSSMANN, I. E., 2008, "Global optimization of multiscenario mixed integer nonlinear programming models arising in the synthesis of integrated water networks under uncertainty", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 32, pp.145-160.
- KIEHL, M., von STRYK, O., 1992, "Real-time optimization of a hydroelectric power plant", *Computing*, vol. 49, pp. 171-191.

KERN, R., 1975, "CE Refresher: How to Compute Pipe Size", *Chemical Engineering*, January, 6, p.115-20.

KOLASSA, J. E., 2006, *Series Approximation Methods in Statistics*, Series: Lecture Notes in Statistics, vol. 88, 3<sup>rd</sup> ed., Ann Arbor: Springer-Verlag New York, Inc., pp. 25-26.

KÜHL, P., DIEHL, M., KRAUS, T., SCHLÖDER, J. P., BOCK, H. G., 2011, "A real-time algorithm for moving horizon state and parameter estimation", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 35, pp. 71-83.

LIU, P., PISTIKOPOULOS, E. N., LI, Z., 2010, "Decomposition based stochastic programming approach for polygeneration energy systems design under uncertainty", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 49, pp. 3295-3305.

LOUZADA, C. H. C. M., 2009, "Projeto Mecânico de dutos terrestres", In: *Engenharia de Dutos*, organizado por José Luiz de França Freire, 1 ed., Rio de Janeiro: ABCM – Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, pp.1.1-20.

LUDWIG, E. E., 1999, *Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants*, Vol. 1, 3<sup>rd</sup> edition, Houston: Gulf Publishing Company.

MAPLES, R.E., 2000, *Petroleum refinery process economics*, 2<sup>nd</sup> edition, Tulsa: PennWell Corporation.

MATTOS, E. E. de, FALCO, R. de, 1998, *Bombas Industriais*, 2 ed., Rio de Janeiro: Editora Interciência.

McALLISTER, E. W. (editor), 2009, *Pipeline rules of thumb Handbook: A manual of quick, accurate solutions to everyday pipeline engineering problems*, 7<sup>th</sup> edition, Burlington: Gulf Professional Publishing, Elsevier Inc.

MORAES, A. C. R., 2007, Contribuições para a gestão da zona costeira do Brasil: Elementos para uma Geografia do Litoral Brasileiro, 1 ed., São Paulo: Annablume, pp. 23-5.

MORARI, M., 1983, "Flexibility and Resiliency of process systems", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 7, n. 4, pp. 423-437.

PARKER, N., 2004, *Using Natural Gas Transmission Pipeline Costs to Estimate Hydrogen Pipeline Costs - UCD-ITS-RR-04-35*, Disponível em: <a href="http://www.its.ucdavis.edu/publications/2004/UCD-ITS-RR-04-35.pdf">http://www.its.ucdavis.edu/publications/2004/UCD-ITS-RR-04-35.pdf</a>, Acesso em: 20 jun 2010.

PETROSKI, H., 1994, *Design Paradigms: Case Studies of Error and Judgement in Engineering*, 1.ed., New York: Cambridge University Press.

PINTO, J. C., LOBÃO, M. W., MONTEIRO, J. L., 1991, "Sequential experimental design for parameter estimation: analysis of relative deviations", *Chemical Engineering Science*, vol. 46, n. 12, pp. 3129-3138.

- PINTO, J. C., 1998, "On the costs of parameters uncertainties: Effects of parameters uncertainties during optimization and design of experiments", *Chemical Engineering Science*, vol. 53, n. 11, pp.2029-2040.
- PINTO, J. C., 2001, "On the costs of parameters uncertainties. Part 2: Impact of EVOP Procedures on the optimization and design of experiments", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 79, pp.412-421.
- PISTIKOPOULOS, E. N., GROSSMANN, I. E., 1988, "Stochastic Optimization of Flexibility in retrofit design of linear systems", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 12, n. 12, pp.1215-1227.
- RENNÓ, M., LUMGRUBER, N., 2009, "O Ciclo de vida de um empreendimento de dutos", In: *Engenharia de Dutos*, organizado por José Luiz de França Freire, 1 ed., Rio de Janeiro: ABCM Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, p.1.1-20.
- RICARDEZ SANDOVAL, L. A., BUDMAN, H. M., DOUGLAS, P. L., 2008, "Simultaneous design and control of processes under uncertainty: A robust modelling approach", *Journal of Process Control*, vol. 18, pp. 735-752.
- ROEBLING, W. A., 2009, *Washington Roebling's Father: A Memoir of John A. Roebling*, edited by Donald Sayenga, 1. ed., Reston: American Society of Civil Engineers.
- RYU, J-H, DUA, V., PISTIKOPOULOS, E. N., 2007, "Proactive scheduling under uncertainty: a parametric optimization approach", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 46, pp. 8044-8049.
- SAKIZLIS, V., PERKINS, J. D., PISTIKOPOULOS, E. N., 2004, "Recent advances in optimization-based simultaneous and control design", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 28, pp. 2069-2086.
- SCHWAAB, M.; PINTO, J. C., 2007, Análise de Dados Experimentais I: Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros, 1 ed. Rio de Janeiro: Epapers.
- SCHWAAB, M., BISCAIA Jr., E. C., MONTEIRO, J. L., PINTO, J. C., 2008a, "Nonlinear parameter estimation through particle swarm optimization", *Chemical Engineering Science*, 63, pp. 1542-1552.
- SCHWAAB, M., MONTEIRO, J. L., PINTO, J. C., 2008b, "Sequential experimental design for model discrimination taking into account the posterior covariance matrix of differences between model predictions", *Chemical Engineering Science*, 63, pp. 2408-2419.
- SOUZA, G. de, ODLOAK, D., ZANIN, A. C., 2010, "Real time optimization (RTO) with model predictive control (MPC)", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 34, pp.1999-2006.

STUCKENBRUCK, S., 2009, "Escoamento de Líquidos e gases em dutos", In: *Engenharia de Dutos*, organizado por José Luiz de França Freire, 1 ed., Rio de Janeiro: ABCM – Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, p.2.1-38.

TARHAN, B., GROSSMANN, I. E., 2008, "A multistage stochastic programming approach with strategies for uncertainty reduction in the synthesis of process networks with uncertain yields", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 32, pp. 766-788.

TERRAZAS-MORENO, S., FLORES-TLACUAHUAC, A., GROSSMANN, I. E., 2008, "Simultaneous design, scheduling and optimal controlo f a Methyl-methacrylate continuous polymerazation reactor", *AIChe Journal*, vol. 54, n. 12, pp. 3160-3170.

THOMPSON, D. E., McAULEY, K. B., McLELLAN, P. J., 2010, "Design of optimal sequential experiments to improve model predictions from a polyethylene molecular weight distribution model", *Macromolecular Reaction Engineering*, vol. 4, pp. 73-85.

THURSTON, D. L., 2006, "Chapter 3 - Utility Function Fundamentals", In: *Decision making in engineering design*, edited by Kemper E. Lewis, Wei Chen, Linda C. Schmidt, New York: ASME Press, pp. 16-19.

VIEIRA, R. D., 2009, "Processos de Fabricação de Tubos", In: *Engenharia de Dutos*, organizado por José Luiz de França Freire, 1 ed., Rio de Janeiro: ABCM – Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, p.5.1-30.

von NEUMANN, J., MORGENSTERN, O., 1947, *Theory of Games and Economic Behavior*, 1ed., Princeton: Princeton University Press.

WEISSTEIN, E., "Weibull Distribuition", 2009, In *Wolfram MathWorld: A Wolfram Web Resource*, Disponível em:

http://mathworld.wolfram.com/WeibullDistribution.htm. Acesso em: 29 nov. 2009.

WOODS, D. R., 2007, *Rules of Thumb in Engineering Practice*, 1 ed., Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

YOU, F., GROSSMANN, I. E., 2008, "Design of responsive supply chains under demand uncertainty", *Computers & Chemical Engineering*, vol. 32, pp. 3090-3111.

ZHANG, Y., MONDER, D., FORBES, J. F., 2002, "Real-time optimization under parametric uncertainty: a probability constrained approach", *Journal of Process Control*, vol. 12, pp. 373-389.

# APÊNDICE I: ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO EMPREGANDO O MÉTODO DE ENXAME DE PARTÍCULAS, COMO PROPOSTO POR SCHWAAB et. al. (2008a) E ASSOCIADO AO MÉTODO DE NEWTON DESCRITO EM SCHWAAB e PINTO (2007).

```
Início
      Definir
      Nit:
                        Número máximo de iterações;
                                     Número de partículas;
      Npt:
                        Número de dimensões a serem otimizadas;
      Nd
      w_0 e w_f:
                        Pesos inerciais inicial e final, respectivamente;
                        Parâmetro de cognição;
      c_1
      c_{2} \\
                        Parâmetro social;
      Tol
                        Tolerância aceitável para parar algoritmo MEP;
                        Vetor de comprimento Nd com limites inferiores do espaço amostral;
      Xmin
      Xmax
                        Vetor de comprimento Nd com limites superiores do espaço amostral;
      NitN:
                        Número máximo de iterações para o Método de Newton;
                        Número máximo de tentativas após o algoritmo, não conseguir achar um próximo ponto mínimo;
      Ntent:
      Tol N
                        Tolerância aceitável para parar algoritmo do Método de Newton.
      Pert Perturbação para cálculo das derivadas
i = 1
Calcular a velocidade máxima das partículas na direção d (SCHWAAB & PINTO, 2007):
      v_d^{\text{max}} = (x_d^{\text{max}} - x_d^{\text{min}})/2;
Calcular as posições e velocidades iniciais das partículas:
x_{p,d}^{k} = x_{d}^{\min} + r. (x_{d}^{\max} - x_{d}^{\min}), \\ v_{p,d}^{k} = v_{d}^{\max}. (2r+1)
      onde r é um número aleatório de distribuição uniforme gerado no intervalo (0, 1)
4. Calcular F^{\text{obj}}_{n}(\mathbf{X});
Registrar as posições e valores das funções objetivo das partículas em um arquivo de saída, para ser usado,
posteriormente, na construção da região de confiança;
Atualizar \mathbf{X}^{\text{global}}, vetor de comprimento Nd que contém a melhor posição encontrada por todo o enxame de partículas;
ENOUANTO (i \le Nit) OU (Desvio > Tol), faca:
      Atualizar \mathbf{X}_{p}^{\text{melhor}}, que consiste em Npt vetores com dimensão Nd contendo a melhor posição encontrada por
      cada partícula do enxame (SCHWAAB & PINTO, 2007):
      w = w_0 + (w_f - w_0).(i/Nit);
      PARA p = 1, ..., Npt, faça:
            PARA d = 1, ..., Nd, faça:
                RA d = 1, ..., Nd, faça:

v_{p,d}^{k+1} = w. v_{p,d}^{k} + c_1. r_1.(x_{p,d}^{\text{melhor}} - x_{p,d}^{k}) + c_2. r_2.(x_d^{\text{global}} - x_{p,d}^{k});

SE v_{p,d}^{k+1} > v_d^{\text{max}}, então:

SE v_{p,d}^{k+1} > 0, então

v_{p,d}^{k+1} = v_d^{\text{max}};

SENÃO v_{p,d}^{k+1} = v_d^{\text{max}}
                        FIMSE
                 x_{p,d}^{k+1} = x_{p,d}^{k} + v_{p,d}^{k}

SE(x_{p,d}^{k+1} > x_d^{\max}), então:

x_{p,d}^{k+1} = x_d^{\max}
                   SENÃO
                        SE (x_{p,d}^{k+1} < x_d^{\min}), então:
```

```
x_{p,d}^{k+1} = x_d^{\min}
FIMSE
                               FIMSE
                    FIMPARA
       FIMPARA
       Calcular Desvio = MÉDIA(x_d^{\text{global}} - x_{p,d}^{k})
       IR PARA O PASSO 4
FIMENQUANTO
Fim do MEP
Inicio do Método de Newton
m = 1;
 \begin{aligned} &\boldsymbol{\lambda}_1 = 1 \,; \\ &\boldsymbol{X}^1 = \boldsymbol{X}^{global} ; \end{aligned} 
F_1 = F_{\text{obj}}(\mathbf{X}^{\text{global}});
35. Calcular numericamente \nabla F_k = \left[ \left( \frac{\partial F_{obj}}{\partial x_1^k} \right)_{X^k} \cdots \left( \frac{\partial F_{obj}}{\partial x_{NP}^k} \right)_{X^k} \right]^T
     \text{Calcular numericamente } \mathbf{H}_{k} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial x_{1}^{k} \partial x_{1}^{k}} \end{bmatrix}_{X^{k}} & \cdots & \begin{bmatrix} \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial x_{1}^{k} \partial x_{NP}^{k}} \end{bmatrix}_{X^{k}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \begin{bmatrix} \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial x_{NP}^{k} \partial x_{1}^{k}} \end{bmatrix}_{X^{k}} & \cdots & \begin{bmatrix} \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial x_{NP}^{k} \partial x_{NP}^{k}} \end{bmatrix}_{X^{k}} \end{bmatrix}
       Calcular numericamente \mathbf{H}_{k}^{-1};
38. \mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k - \lambda_k \cdot \mathbf{H}_k^{-1} \cdot \nabla F_k;
       Calcular G_k = F_{\text{obj}}(\mathbf{X}^{k+1});
       SE (G_k < F_k) então:
                     Calcular Desvio = Norma(\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k)
                    SE (Desvio > Tol_N), então
                       k = k + 1;
                           \lambda_k = 1;
                            F_k = G_k;
                            IR PARA O PASSO 35
                    SENÃO
                              PARE
               FIMSE
       SENÃO
                         \Delta F_{obj}^{lin} = \left(\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^{k}\right)^{T} \cdot \nabla F_{k} + \frac{1}{2} \left(\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^{k}\right)^{T} \mathbf{H}_{k} \left(\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^{k}\right)
                           SE \Delta F_{obj}^{lin} > 0, então:
                                   \lambda_k = -\lambda_k
                                   m = m + 1
                                       IR PARA O PASSO 38
                             SENÃO
                                        Selecionar aleatoriamente r com distribuição uniforme no intervalo (0, 1)
                                    \lambda_k = r \cdot \lambda_k
                                   m = m + 1
                                        IR PARA O PASSO 38
                             FIMSE
                       SENÃO
                                 PARE
                  FIMSE
    FIMSE
```

### APÊNDICE II: ALGORITMO PARA BUSCA DO PROJETO DE ROBUSTEZ MÁXIMA, UMA VEZ CONHECIDA A FRONTEIRA DA REGIÃO DE CONFIANÇA PARAMÉTRICA.

Início

Ler arquivo com *Npontos* de coordenadas paramétricas  $[k_1, k_2]$  da região de confiança;

```
Determinar k_1min e k_1max do conjunto acima;

Estipular número de classes Nclasses

\Delta k_1 = (k_1max - k_1min)/(Nclasses - 1)

PARA i = 1, ..., Npontos

PARA j = 1, ..., Nclasses

Limite\_inferior = k_1min + \Delta k_1.(j - 1);

Limite\_superior = k_1min + \Delta k_1.j;

SE (k_1(i) > Limite\_inferior E k_1(i) \leq Limite\_superior) ENTÃO k_2min(j) = menor k_2(i)

k_2max(j) = maior k_2(i)

FIM SE
```

FIM PARA

Usar rotina de otimização mista ENXAME DE PARTÍCULAS/NEWTON-RAPHSON para encontrar vetor Ψ de variáveis de projeto que proporcionem Lucro máximo, sendo guardado o vetor Ψ e *Lucro*; Sorteia-se aleatoriamente pontos no interior da região confiança, aplica-se a rotina de otimização mista ENXAME

DE PARTÍCULAS/NEWTON-RAPHSON, obtendo-se Ψ\* e *Lucro*\*

```
SE Lucro* < Lucro, ENTÃO Lucro = Lucro* \\ \Psi = \Psi * FIM SE FIM
```

### APÊNDICE III: ALGORITMO PARA DETERMINAÇÃO DE TRADE OFF ENTRE ROBUSTEZ, OPORTUNIDADE E NÍVEL DE RECOMPENSA CRÍTICA.

```
Início
Entrar k_1_central, k_2_central que correspondem os parâmetros obtidos pelo procedimento de Estimação de
Ler arquivo com Npontos de coordenadas paramétricas [k_1, k_2] da região de confiança;
Determinar k_1min, k_1max, k_2_inferior e k_2 superior do conjunto acima;
Estipular número de classes Nclasses
\Delta k_1 = (k_1 max - k_1 min)/(Nclasses - 1)
PARA i = 1, ..., Npontos
           PARA j = 1, ..., Nclasses
                      Limite\_inferior(j) = k_1 min + \Delta k_1 \cdot (j-1);
                      Limite\_superior(j) = k_1 min + \Delta k_1.j;
                      SE (k_l(i) > Limite\_inferior(j)) E k_l(i) \leq Limite\_superior(j)) ENTÃO
                                 k_2 min(j) = menor k_2(i)
                                 k_2 max(j) = maior k_2(i)
                      FIM SE
           FIM PARA
FIM PARA
Desvio\_max\_K_l = Máximo\{ABS(k_l max - k_l\_central), ABS(k_l min - k_l\_central)\}
Desvio\_max\_K_2 = Maximo\{ABS(k_2\_inferior - k_2\_central), ABS(k_2\_superior - k_2\_central))\}
Entrar com vetor de variáveis de projeto \Psi_0, R_{c0} (recompensa crítica) e R_w
Chamar rotina Calcula_Robustez(\Psi_0, R_{c0}, \alpha_0, Lucro_min)
Chamar rotina Calcula Oportunidade(\Psi_0, R_{w0}, \beta_0, Lucro)
p = 0
FAÇA
           R_c = R_{c0} + p \cdot \Delta R_c
           Chamar Otimizar Robustez(Ψ, R<sub>c</sub>, α, Niter)
           Chamar rotina Calcula Oportunidade(\Psi, R_w, \beta)
           p = p + 1
ENQUANTO (ABS(\alpha_0 - \alpha)<=\Delta \alpha E.R<sub>c</sub> < R<sub>w</sub>)
Rotina Calcula Robustez(Ψ, R<sub>c</sub>, α, Lucro min)
Dado Npasso
           Incremento=1,0/ Npasso
PARA m = 1, ..., Npasso + 1
           \alpha = 1,0 - (m-1)^* Incremento
           k_1 min0 = k_1 \_central - \alpha . Desvio \_max \_K_1
           k_2 \min 0 = k_2 \_central - \alpha . Desvio\_max\_K_2
           k_1 max0 = k_1 \_central + \alpha . Desvio \_max \_K_1
           k_2 max0 = k_2\_central + \alpha . Desvio\_max\_K_2
           PARA j = 1, ..., Nclasses
                      SE k_2 min0 \ge k_2 min(j), ENTÃO
                                 SE k_2 max0 \le k_2 max(j), ENTÃO
                                            k_{1,1} = Limite\_inferior(j)
                                            k_{1,2} = Limite\_superior(j)
                                            SAIR
                                 FIM SE
                      SENÃO
                                 SE j = 1, ENTÃO
                                            k_{I,I} = k_I min 0
                                            k_{1,2} = k_1 max 0
                                            SAIR
```

```
FIM SE
         FIM SE
FIM PARA
\mathsf{PARA}\, j = 1,\, ...,\, Nclasses
         SE k_2 max0 \ge k_2 max(Nclasses + 1 - j), ENTÃO
                   SE k_2 min0 \le k_2 min(Nclasses + 2 - j), ENTÃO
                             k_{1,3} = Limite\_inferior(Nclasses+1 - j)
                             k_{1,4}= Limite_superior(Nclasses+1 -j)
                             SAIR
                   FIM SE
                   SENÃO
                   SE j = 1, ENTÃO
                             k_{I,I} = k_I min \theta
                             k_{1,2} = k_1 max 0
                             SAIR
                   FIM SE
         FIM SE
FIM PARA
x = 0;
         y = 0;
                  z=0;
                             w = 0
PARA j = 1, ..., Nclasses
         SE k_1 min0 \ge Limite\_inferior(j), ENTÃO
                   x = i
                   SAIR
         FIM SE
FIM PARA
SE x = 0, ENTÃO
         k_{2,I} = k_2 min \theta
SENÃO
         k_{2,1} = k_2 min(x)
FIM SE
PARA j = 1, ..., Nclasses
         SE k_1 min0 \ge Limite\_inferior(Nclasses+1 - j), ENTÃO
                   y = i
                   SAIR
         FIM SE
FIM PARA
SE y = 0, ENTÃO
         k_{2,2} = k_2 max 0
SENÃO
         k_{2,2} = k_2 max(Nclasses - x)
FIM SE
PARA j = 1, ..., N classes
         SE k_1 max0 \le Limite\_superior(j), ENTÃO
                   z = i
                   SAIR
         FIM SE
FIM PARA
SE z = 0, ENTÃO
         k_{2,3} = k_2 min \theta
SENÃO
         k_{2,3} = k_2 min(z)
FIM SE
PARA j = 1, ..., Nclasses
         SE k_1 max0 \le Limite\_superior(Nclasses+1 - j), ENTÃO
                   w = i
                   SAIR
         FIM SE
FIM PARA
         FIM SE
FIM PARA
SE w = 0, ENTÃO
         k_{2,4} = k_2 max 0
SENÃO
         k_{2,4} = k_2 max(Nclasses - w)
FIM SE
SE k_{I,I} < k_I min0, ENTÃO
```

 $k_{I,I} = k_I min \theta$ 

```
FIM SE
          SE k_{1,2} < k_1 max 0, ENTÃO
                     k_{1,2} = k_1 max 0
          FIM SE
          SE k_{1,3} < k_1 min0, ENTÃO
                     k_{1,3} = k_1 min 0
          FIM SE
          SE k_{I,4} > k_{I} max 0, ENTÃO
                     k_{1.4} = k_1 max 0
          FIM SE
          SE k_{2,1} > k_2 min0, ENTÃO
                     k_{2,1} = k_2 min 0
          FIM SE
          SE k_{2,2} > k_2 max 0, ENTÃO
                     k_{2,2} = k_2 max 0
          FIM SE
          SE k_{2,3} < k_2 min0, ENTÃO
                     k_{2,3} = k_2 min 0
          FIM SE
          SE k_{2,4} > k_2 max 0, ENTÃO
                     k_{2,4} = k_2 max 0
          FIM SE
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_{1,1}, k_2min0, Valor1)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_{1,2}, k_2min0, Valor2)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_{1,3}, k_2max0, Valor3)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_{1,4}, k_2max0, Valor4)
           Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_1min0, k_{2,1}, Valor5)
           Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_1min0, k_{2,2}, Valor6)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_1 max \theta, k_{2,3}, Valor 7)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_1 max 0, k_{2.4}, Valor 8)
          Lucro\_min = Minimo(Valor1, Valor2, Valor3, Valor4, Valor5, Valor6, Valor7, Valor8)
          SE (Lucro_min >=Rc) THEN
                     SAIR
          FIM SE
FIM PARA
Rotina Calcula Oportunidade(Ψ, R<sub>w</sub>, β)
Dado Npasso
          Incremento=1,0/ Npasso
PARA m = 1, ..., Npasso + 1
          \alpha = 1,0 - (m-1)^* Incremento
          k_1 min0 = k_1 \_central - \alpha . Desvio\_max\_K_1
          k_2 \min 0 = k_2 \_central - \alpha . Desvio\_max\_K_2
          k_1 max0 = k_1 \_central + \alpha . Desvio \_max \_K_1
          k_2 max0 = k_2\_central + \alpha . Desvio\_max\_K_2
          PARA j = 1, ..., Nclasses
                     SE k_2 min0 \ge k_2 min(j), ENTÃO
                                SE k_2 max0 \le k_2 max(j), ENTÃO
                                           k_{1,1} = Limite\_inferior(j)
                                           k_{1,2} = Limite\_superior(j)
                                           SAIR
                                FIM SE
                     SENÃO
                                SE j = 1, ENTÃO
                                           k_{I,I} = k_I min \theta
                                           k_{1,2} = k_1 max0
                                           SAIR
                                FIM SE
                     FIM SE
          FIM PARA
          \mathsf{PARA}\, j = 1,\, ...,\, Nclasses
                     SE k_2 max0 \ge k_2 max(Nclasses + 1 - j), ENTÃO
                                SE k_2 min0 \le k_2 min(Nclasses + 2 - j), ENTÃO
                                           k_{1,3} = Limite\_inferior(Nclasses+1 - j)
                                           k_{1.4}= Limite_superior(Nclasses+1 -j)
                                FIM SE
```

```
SENÃO
                   SE j = 1, ENTÃO
                             k_{I,I} = k_I min 0
                             k_{1,2} = k_1 max 0
                             SAIR
                    FIM SE
          FIM SE
FIM PARA
x = 0; y = 0;
                  z = 0;
                             w = 0
PARA j = 1, ..., Nclasses
          SE k_1 min0 \ge Limite\_inferior(j), ENTÃO
                   SAIR
          FIM SE
FIM PARA
SE x = 0, ENTÃO
          k_{2,1} = k_2 min 0
SENÃO
          k_{2,1} = k_2 min(x)
FIM SE
PARA j = 1, ..., Nclasses
          SE k_1 min0 \ge Limite\_inferior(Nclasses+1 - j), ENTÃO
                   y = i
                   SAIR
          FIM SE
FIM PARA
SE y = 0, ENTÃO
          k_{2,2} = k_2 max 0
SENÃO
          k_{2,2} = k_2 max(Nclasses - x)
FIM SE
PARA j = 1, ..., Nclasses
          SE k_1 max0 \le Limite\_superior(j), ENTÃO
                   z = i
                   SAIR
          FIM SE
FIM PARA
SE z = 0, ENTÃO
         k_{2,3} = k_2 min0
SENÃO
          k_{2,3} = k_2 min(z)
FIM SE
PARA j = 1, ..., Nclasses
          SE k_1 max0 \le Limite\_superior(Nclasses+1-j), ENTÃO
                   w = i
                   SAIR
          FIM SE
FIM PARA
          FIM SE
FIM PARA
SE w = 0, ENTÃO
          k_{2,4} = k_2 max 0
SENÃO
          k_{2,4} = k_2 max(Nclasses - w)
FIM SE
SE k_{I,I} < k_I min0, ENTÃO
          k_{I,I} = k_I min 0
FIM SE
SE k_{1,2} < k_1 max 0, ENTÃO
          k_{1,2} = k_1 max 0
FIM SE
SE k_{1,3} < k_1 min0, ENTÃO
          k_{I,3} = k_I min 0
FIM SE
SE k_{I,4} > k_{I} max 0, ENTÃO
          k_{1,4} = k_1 max 0
```

FIM SE

```
SE k_{2,1} > k_2 min0, ENTÃO
                     k_{2,1} = k_2 min \theta
          FIM SE
          SE k_{2,2} > k_2 max 0, ENTÃO
                     k_{2,2} = k_2 max\theta
          FIM SE
          SE k_{2,3} < k_2 min0, ENTÃO
                     k_{2,3} = k_2 min \theta
          FIM SE
          SE k_{2,4} > k_2 max 0, ENTÃO
                     k_{2,4} = k_2 max\theta
          FIM SE
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_{I,I}, k_2min0, ValorI)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_{1,2}, k_2min0, Valor2)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_{1,3}, k_2max0, Valor3)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_{1,4}, k_2max0, Valor4)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_1min0, k_{2,1}, Valor5)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_1min0, k_2, k_3, k_4)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_1 max0, k_{2,3}, Valor7)
          Chamar rotina Funcao_Objetivo(\Psi, k_1 max 0, k_{2,4}, Valor 8)
          Lucro_min=Máximo(Valor1, Valor2, Valor3, Valor4, Valor5, Valor6, Valor7, Valor8)
          SE (Lucro_max >=Rc) THEN
                     SAIR
          FIM SE
FIM PARA
```

# APÊNDICE IV: ALGORITMO DE PLANEJAMENTO SEQUENCIAL DE EXPERIMENTOS PARA DETERMINAÇÃO DO NOVO PONTO EXPERIMENTAL, SEGUNDO PROCEDIMENTO PROPOSTO POR SCHWAAB *et al.* (2008b).

Início Entrar:

PE<sub>0</sub> Plano experimental inicial

N Número de experimentos iniciais NX Número de variáveis de entrada

Xmin Vetor de comprimento NX (número de variáveis de entrada) com limites inferiores do espaço

amostral;

Xmax Vetor de comprimento NX (número de variáveis de entrada) com limites superiores do espaço

amostral;

NI intervalo de espaçamento para geração da grade de pontos factíveis para realização de

experimentos;

Dado PE<sub>0</sub>, calcular

$$\mathbf{V}_{\hat{\varphi}} = \left[ \mathbf{B}^T \mathbf{V}_Y^{-1} \mathbf{B} \right]^{-1} \tag{IV.1}$$

onde **B** é definido pela Equação (E.5);

```
PARA i = 1, ..., NX, faça:
    PARA j = 1, ..., NI(i), faça:
    Pontos(i, j) = X\min(i) + (j-1).(X\max(i)-X\min(i))/[N(i)-1]
    FIMPARA

FIMPARA

PARA k = 1, ..., NI(1), faça:
    PARA k = 1, ..., NI(2), faça:
    PARA k = 1, ..., NI(2), faça:
    PARA k = 1, ..., NI(NX), faça:
    \mathbf{X}_{N+1} = \{PE_0, [Grade(1,j),..., Grade(NX,j)]\}
    \hat{\mathbf{V}}_{\varphi}(\mathbf{x}_{N+1}) = \left[\mathbf{B}^T(\mathbf{x}_{N+1})\mathbf{V}_{\gamma}^{-1}(\mathbf{x}_{N+1})\mathbf{B}(\mathbf{x}_{N+1}) + \mathbf{V}_{\varphi}^{-1}\right]^{-1}
    Grade(k, l, ..., m) = tr\left[\hat{\mathbf{V}}_{\varphi}(\mathbf{x}_{N+1})\right]
    FIMPARA
    FIMPARA
    FIMPARA
Encontrar min[Grade(k, l, ..., m)]
```

Reportar {Pontos(1, k), Pontos(2, k), ..., Pontos(NX, k)} como novo ponto experimental da sequência.

# APÊNDICE V: DADOS DE ENTRADA E RESULTADOS ADICIONAIS OBTIDOS APÓS ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E DELIMITAÇÃO DA REGIÃO DE CONFIANÇA PARAMÉTRICA PARA O PROBLEMA DO CAPÍTULO 4.

V.1 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Uniforme com Vetor de Desvios padrão A. Estimação de Parâmetros empregando FMQP

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

 $k_1$ : [1,50; 3,50]  $h^{-1}$   $k_2$ : [0,50; 1,50]  $h^{-1}$ 

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Tabela V-1: Resultado da Estimação de parâmetros, usando intervalo de confiança de 95% com teste *t*-Student, conforme Equação 8.

Parâmetro	Valor	IC inferior	IC superior
$k_1 [h^{-1}]$	2,6328	2,4734	2,7922
$k_2 [h^{-1}]$	0,9905	0,8767	1,1044

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \begin{bmatrix} 2,45.10^{-4} & -9,65.10^{-6} \\ -9,65.10^{-6} & 1,25.10^{-4} \end{bmatrix}$$

Matriz covariância paramétrica estimada com a aproximação [Equação (IV.1)]:

$$\mathbf{V}_{\varphi} \cong \begin{bmatrix} 2.21.10^{-4} & -8.53.10^{-6} \\ -8.53.10^{-6} & 1.25.10^{-4} \end{bmatrix}$$

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos (Apêndice IV):

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0,60 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 2,32.10^{-4}$ 

V.2 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Uniforme com Vetor de Desvios padrão B. Estimação de Parâmetros empregando FMQP

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

 $k_1$ : [0,80; 3,50]  $h^{-1}$   $k_2$ : [0,50; 1,50]  $h^{-1}$ 

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Tabela V-2: Resultado da Estimação de parâmetros, usando intervalo de confiança de 95% com teste t-Student, conforme Equação 8.

Parâmetro	Valor	IC inferior	IC superior
$k_1 [h^{-1}]$	1,6675	1,2480	2,0872
$k_2 [h^{-1}]$	0,9643	0,7206	1,2080

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \begin{bmatrix} 3.93.10^{-3} & 6.29.10^{-4} \\ 6.29.10^{-4} & 1.33.10^{-3} \end{bmatrix}$$

Matriz covariância paramétrica estimada com a aproximação [Equação (IV.1)]:

$$\mathbf{V}_{\varphi} \cong \begin{bmatrix} 4,59.10^{-3} & 5,69.10^{-4} \\ 5,69.10^{-4} & 1,20.10^{-3} \end{bmatrix}$$

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Sequencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0.40 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 4.22.10^{-3}$ 

V.3 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Normal com Vetor de Desvios padrão A. Estimação de Parâmetros empregando FMQP

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

$$k_1$$
: [1,50; 3,50]  $h^{-1}$ 

$$k_2$$
: [0,50; 1,50] h

Elimites estabelections para as faixas de Busca no Espaço Farametrico.  

$$k_1$$
: [1,50; 3,50] h<sup>-1</sup>  $k_2$ : [0,50; 1,50] h<sup>-1</sup>  
Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21

Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Tabela V-3: Resultado da Estimação de parâmetros, usando intervalo de confiança de 95% com teste t-Student conforme Fauscão 8

Student, comornie Equação 8.										
Parâmetro	Valor	IC inferior	IC superior							
$k_1 [h^{-1}]$	2,5095	2,3276	2,6914							
$k_2 [h^{-1}]$	0,9817	0,9265	1,0369							

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \begin{bmatrix} 3.59.10^{-3} & -7.93.10^{-5} \\ -7.93.10^{-5} & 3.30.10^{-4} \end{bmatrix}$$

Matriz covariância paramétrica estimada com a aproximação [Equação (IV.1)]:

$$\mathbf{V}_{\varphi} \cong \begin{bmatrix} 3.83.10^{-3} & -9.25.10^{-5} \\ -9.25.10^{-5} & 3.26.10^{-4} \end{bmatrix}$$

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Sequencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0.30 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\odot}) = 2.68.10^{-3}$ 

#### V.4 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Normal com Vetor de Desvios padrão B. Estimação de Parâmetros empregando FMQP

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

 $k_2$ : [0,001; 10,000] h<sup>-1</sup>  $k_1$ : [1,00; 2,50]  $h^{-1}$ 

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Tabela III-4: Resultado da Estimação de parâmetros, usando intervalo de confiança de 95% com teste t-

Student, conforme Equação 8. Valor IC inferior IC superior 1,5899 1,1095 2,0704  $k_2 [h^{-1}]$ 1,1218 -0,2885 2,5321

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \begin{bmatrix} 6,04.10^{-4} & -1,42.10^{-4} \\ -1,42.10^{-4} & 5,20.10^{-3} \end{bmatrix}$$

Matriz covariância paramétrica estimada com a aproximação [Equação (IV.1)]:

$$\mathbf{V}_{\varphi} \cong \begin{bmatrix} 7.97.10^{-4} & -8.92.10^{-5} \\ -8.92.10^{-5} & 5.08.10^{-3} \end{bmatrix}$$

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Sequencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 1,50 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\odot}) = 4,14.10^{-3}$ 

#### Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Weibull com Vetor de Desvios padrão C. Estimação de Parâmetros empregando FMOP

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

 $k_1$ : [1,50; 3,50] h<sup>-1</sup>  $k_2$ : [0,50; 1,50] h<sup>-1</sup> Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ :

Tabela V-5: Resultado da Estimação de parâmetros, usando intervalo de confiança de 95% com teste t-Student, conforme Equação 8.

Parâmetro	Valor	IC inferior	IC superior
$k_1 [h^{-1}]$	2,3906	2,2404	2,5408
$k_2 [h^{-1}]$	0,9995	0,9583	1,0406

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \begin{bmatrix} 4,36.10^{-4} & -4,96.10^{-5} \\ -4,96.10^{-5} & 3,68.10^{-5} \end{bmatrix}$$

Matriz covariância paramétrica estimada com a aproximação [Equação (IV.1)]:

$$\mathbf{V}_{\varphi} \cong \begin{bmatrix} 4,50.10^{-4} & -5,12.10^{-5} \\ -5,12.10^{-5} & 3,29.10^{-5} \end{bmatrix}$$

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Sequencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0.40 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 3.15.10^{-3}$ 

V.6 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Weibull com Vetor de Desvios padrão D. Estimação de Parâmetros empregando FMOP

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

$$k_1$$
: [0,80; 3,50]  $h^{-1}$   $k_2$ : [0,50; 1,00]  $h^{-1}$ 

$$k_1$$
: [0,80; 3,50] h<sup>-1</sup>  $k_2$ : [0,50; 1,00] h<sup>-1</sup> Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Tabela V-6: Resultado da Estimação de parâmetros, usando intervalo de confiança de 95% com teste t-Student conforma Equação 8

Parâmetro	Valor	IC inferior	IC superior
$k_1 [h^{-1}]$	1,1946	0,9572	1,4321
$k_2 [h^{-1}]$	0,7805	0,2928	1,2682

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \begin{bmatrix} 3.99.10^{-3} & 6.24.10^{-4} \\ 6.24.10^{-4} & 1.68.10^{-2} \end{bmatrix}$$

Matriz covariância paramétrica estimada com a aproximação [Equação (IV.1)]:  $\mathbf{V}_{_{\!\!\!/}}\cong\begin{bmatrix}4,68.10^{-3}&7,\!10.10^{-4}\\7,\!10.10^{-4}&1,\!66.10^{-2}\end{bmatrix}$ 

$$\mathbf{V}_{\varphi} \cong \begin{bmatrix} 4,68.10^{-3} & 7,10.10^{-4} \\ 7,10.10^{-4} & 1,66.10^{-2} \end{bmatrix}$$

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Sequencial de Experimentos:

mentos:  

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 1,90 \text{ h} \qquad tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 1,56.10^{-2}$$

V.7 Dados pseudoexperimentais proveniente do Modelo Langmuir com Distribuição de Probabilidade Normal e Vetor de Desvios padrão A. Estimação de Parâmetros empregando FMQP

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

$$k_1$$
: [0,80; 3,50]  $h^{-1}$   $k_2$ : [0,50; 1,00]  $h^{-1}$ 

Faixa da Grade experimental 
$$C_{A0}$$
: [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Tabela V-7: Resultado da Estimação de parâmetros, usando intervalo de confiança de 95% com teste *t*-

Student, comorne Equação 6.											
Parâmetro	Valor	IC inferior	IC superior								
$k_1 [h^{-1}]$	2,7242	2,3483	3,1002								
$k_2 [h^{-1}]$	1,0169	0,7869	1,2469								

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \begin{bmatrix} 1,75.10^{-3} & 6,28.10^{-5} \\ 6,28.10^{-5} & 6,54.10^{-4} \end{bmatrix}$$

Matriz covariância paramétrica estimada com a aproximação [Equação (IV.1)]:

$$\mathbf{V}_{\varphi} \cong \begin{bmatrix} 2,00.10^{-3} & 6,19.10^{-5} \\ 6,19.10^{-5} & 6,40.10^{-4} \end{bmatrix}$$

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos (Apêndice II):

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0.50 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 1.78.10^{-3}$ 

V.8 Dados pseudoexperimentais proveniente do Modelo Langmuir com Distribuição de Probabilidade Normal e Vetor de Desvios padrão B. Estimação de Parâmetros empregando FMQP

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

$$k_1$$
: [0,50; 7,00]  $h^{-1}$   $k_2$ : [0,05; 10,0]  $h^{-1}$ 

Faixa da Grade experimental 
$$C_{A0}$$
: [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Tabela V-8: Resultado da Estimação de parâmetros, usando intervalo de confiança de 95% com teste *t*-Student, conforme Equação 8.

Student, comornie Equação 8.										
Parâmetro	Valor	IC inferior	IC superior							
$k_1 [h^{-1}]$	1,7590	1,1911	2,3269							
$k_2 [h^{-1}]$	1,3340	0,4282	2,2398							

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \begin{bmatrix} 6.56.10^{-3} & -3.23.10^{-3} \\ -3.23.10^{-3} & 1.67.10^{-2} \end{bmatrix}$$

Matriz covariância paramétrica estimada com a aproximação [Equação (IV.1)]:

$$\mathbf{V}_{\varphi} \cong \begin{bmatrix} 1,06.10^{-2} & -5,15.10^{-3} \\ -5,15.10^{-3} & 1,99.10^{-2} \end{bmatrix}$$

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 1,00 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\odot}) = 2,17.10^{-2}$ 

V.9 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Uniforme com Vetor de Desvios padrão A. Estimação de Parâmetros empregando Reconciliação de Dados

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

```
k_1:
              [1,50; 3,50] h^{-1}
                                                           k_2:
                                                                      [0,50; 1,50] h^{-1}
             [1100; 1300] \text{ kg/m}^3
                                                                     [0,900; 2,90] h
(C_{A0})_1:
                                                           \Theta_1:
                                                           \Theta_2:
             [700; 900] \text{ kg/m}^3
                                                                     [0,900; 2,90] h
(C_{A0})_2:
             [1100; 1300] \text{ kg/m}^3
(C_{A0})_3:
                                                           \Theta_3:
                                                                     [0,001; 0,40] h
             [700; 900] \text{ kg/m}^3
(C_{A0})_4:
                                                           \Theta_4:
                                                                     [0,001; 0,40] h
             [900; 1100] \text{ kg/m}^3
                                                                     [0,500; 1,50] h
(C_{A0})_5:
                                                           \Theta_5:
```

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21

Número de pontos em Θ: 19

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

	$k_1$	$k_2$	$(C_{A\theta})_1$	$(C_{A0})_2$	$(C_{A0})_3$	$(C_{A0})_4$	$(C_{A0})_5$	$\Theta_1$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\Theta_4$	$\Theta_5$
-	6,31	2,48	19,00	-2,92	0,37	2,18	-31,18	-4,09	-5,72	-0,24	-0,25	-2,68
	2,48	0,98	7,17	-1,31	0,17	0,87	-10,79	-1,61	-2,28	-0,10	-0,10	-1,05
	19,00	7,17	170,44	7,40	-1,32	5,45	-236,74	-12,15	-13,88	-0,73	-0,76	-8,85
	-2,92	-1,31	7,40	12,67	-1,10	-1,64	-81,30	1,98	4,82	0,11	0,12	0,73
	0,37	0,17	-1,32	-1,10	11,43	0,19	2,29	-0,25	-0,51	-0,01	-0,01	-0,13
	2,18	0,87	5,45	-1,64	0,19	31,21	-5,00	-1,42	-2,11	-0,08	-0,07	-0,90
	-31,18	-10,79	-236,74	-81,30	2,29	-5,00	1058,19	19,39	7,99	1,20	1,24	18,08
	-4,09	-1,61	-12,15	1,98	-0,25	-1,42	19,39	2,66	3,73	0,16	0,16	1,74
	-5,72	-2,28	-13,88	4,82	-0,51	-2,11	7,99	3,73	5,65	0,22	0,23	2,32
	-0,24	-0,10	-0,73	0,11	-0,01	-0,08	1,20	0,16	0,22	0,01	0,01	0,10
	-0,25	-0,10	-0,76	0,12	-0,01	-0,07	1,24	0,16	0,23	0,01	0,01	0,11
	-2,68	-1,05	-8,85	0,73	-0,13	-0,90	18,08	1,74	2,32	0,10	0,11	1,17

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos (Apêndice IV):

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 1.10 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\odot}) = 243.95$ 

V.10 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Uniforme com Vetor de Desvios padrão B. Estimação de Parâmetros empregando Reconciliação de Dados

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

```
[0.80; 3.50] \,\mathrm{h}^{-1}
                                                                        [0,50; 1,50] h^{-1}
k_1:
                                                             k_2:
(C_{A0})_1:
              [1100; 1300] \text{ kg/m}^3
                                                                        [0,900; 2,90] h
                                                             \Theta_1:
              [700; 900] \text{ kg/m}^3
                                                             \Theta_2:
(C_{A0})_2:
                                                                        [0,900; 2,90] h
              [1100; 1300] \text{ kg/m}^3
(C_{A0})_3:
                                                                        [0,001; 0,40] h
                                                             \Theta_3:
(C_{A0})_4:
              [700; 900] \text{ kg/m}^3
                                                             \Theta_4:
                                                                        [0,001; 0,40] h
              [ 900; 1100] kg/m<sup>3</sup>
                                                             \Theta_5:
                                                                        [0,500; 1,50] h
(C_{A0})_5:
```

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

١	$k_1$	$k_2$	$(C_{A\theta})_1$	$(C_{A0})_2$	$(C_{A0})_3$	$(C_{A0})_4$	$(C_{A0})_5$	$\Theta_1$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\Theta_4$	$\Theta_5$
	35,21	16,90	-57,01	105,63	-6,83	4,43	9,97	-23,31	-48,52	-1,55	-2,31	-28,03
	16,90	8,13	-27,04	47,26	-3,13	2,22	5,26	-11,21	-22,78	-0,74	-1,11	-13,75
	-57,01	-27,04	184,78	-220,33	22,27	-18,46	-7,87	37,37	88,33	2,51	3,76	39,73
	105,63	47,26	-220,33	1412,50	-42,74	18,05	-108,05	-65,90	-303,01	-4,67	-6,96	3,35
	-6,83	-3,13	22,27	-42,74	20,21	-1,83	3,55	4,36	13,01	0,30	0,47	3,29
	4,43	2,22	-18,46	18,05	-1,83	190,24	1,22	-2,98	-9,44	-0,19	-0,34	-2,13
	9,97	5,26	-7,87	-108,05	3,55	1,22	23,43	-7,16	6,76	-0,43	-0,64	-19,42
	-23,31	-11,21	37,37	-65,90	4,36	-2,98	-7,16	15,46	31,53	1,02	1,53	18,91
	-48,52	-22,78	88,33	-303,01	13,01	-9,44	6,76	31,53	90,40	2,14	3,19	25,56
	-1,55	-0,74	2,51	-4,67	0,30	-0,19	-0,43	1,02	2,14	0,07	0,10	1,23
	-2,31	-1,11	3,76	-6,96	0,47	-0,34	-0,64	1,53	3,19	0,10	0,15	1,83
	-28,03	-13,75	39,73	3,35	3,29	-2,13	-19,42	18,91	25,56	1,23	1,83	29,62

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos (Apêndice IV):

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0.70 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\varphi}) = 7048.81$ 

V.11 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Normal com Vetor de Desvios padrão A. Estimação de Parâmetros empregando Reconciliação de Dados

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

$k_1$ :	$[1,50; 3,50] h^{-1}$	$k_2$ :	$[0,50; 1,50] \text{ h}^{-1}$
$(C_{A0})_1$ :	$[1100; 1300] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_1$ :	[0,900; 2,90] h
	2		
$(C_{A0})_2$ :		$\Theta_2$ :	[0,900; 2,90] h
$(C_{A0})_3$ :	$[1100; 1300] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_3$ :	[0,001; 0,40] h
$(C_{A0})_4$ :	$[700; 900] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_4$ :	[0,001; 0,40] h
$(C_{A0})_5$ :	$[900; 1100] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_5$ :	[0,500; 1,50] h

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$k_{1}$	$k_2$	$(C_{A0})_1$	$(C_{A0})_2$	$(C_{A0})_3$	$(C_{A0})_4$	$(C_{A0})_5$	$\Theta_1$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\Theta_4$	$\Theta_5$
90,1	30,8	-2641,2	-1236,2	-101,4	-15,6	5609,8	-16,5	-48,0	-3,1	-3,5	-75,7
30,8	10,8	-901,0	-63,3	-33,7	-4,5	1770,5	-5,8	-21,5	-1,1	-1,2	-24,8
-2641,2	-901,0	77550,7	41245,3	2986,6	463,6	-1,67E+05	483,0	1339,7	92,1	103,9	2238,3
-1236,2	-63,3	41245,3	570546,1	2956,0	1285,9	-3,30E+05	64,0	-7122,3	45,3	52,5	2879,8
-101,4	-33,7	2986,6	2956,0	134,9	22,8	-7043,2	18,1	32,1	3,5	4,0	90,5
-15,6	-4,5	463,6	1285,9	22,8	57,8	-1410,3	2,5	-6,9	0,6	0,6	16,3
5609,8	1770,5	-1,67E+05	-3,30E+05	-7043,2	-1410,3	471154,1	-960,9	549,5	-194,7	-222,2	-5597,2
-16,5	-5,8	483,0	64,0	18,1	2,5	-960,9	3,1	11,1	0,6	0,6	13,4
-48,0	-21,5	1339,7	-7122,3	32,1	-6,9	549,5	11,1	135,1	1,6	1,8	14,6
-3,1	-1,1	92,1	45,3	3,5	0,6	-194,7	0,6	1,6	0,1	0,1	2,6
-3,5	-1,2	103,9	52,5	4,0	0,6	-222,2	0,6	1,8	0,1	0,1	3,0
-75,7	-24,8	2238,3	2879,8	90,5	16,3	-5597,2	13,4	14,6	2,6	3,0	70,0

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos (Apêndice IV):

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0,60 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\varphi}) = 1919,03$ 

V.12 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Normal com Vetor de Desvios padrão B. Estimação de Parâmetros empregando Reconciliação de Dados

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

```
[0,80; 3,50] \,\mathrm{h}^{-1}
                                                                        [0,05; 10,0] \, h^{-1}
k_1:
                                                            k_2:
              [900; 1500] \text{ kg/m}^3
                                                                        [0,800; 3,00] h
(C_{A0})_1:
                                                             \Theta_1:
              [400; 1200] \text{ kg/m}^3
                                                                       [0,800; 3,00] h
(C_{A0})_2:
                                                            \Theta_2:
             [900; 1500] \text{ kg/m}^3
                                                            \Theta_3:
                                                                       [0,001; 0,40] h
(C_{A0})_3:
             [400; 1200] \text{ kg/m}^3
(C_{A0})_4:
                                                            \Theta_4:
                                                                        [0,001; 0,40] h
              [800; 1200] \text{ kg/m}^3
(C_{A0})_5:
                                                            \Theta_5:
                                                                       [0,300; 1,70] h
```

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

-								1 3	` /		
$k_{1}$	$k_2$	$(C_{A0})_1$	$(C_{A0})_2$	$(C_{A0})_3$	$(C_{A0})_4$	$(C_{A0})_5$	$\Theta_1$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\Theta_4$	$\Theta_5$
2181,4	726,6	23053,0	419589,8	-1421,5	527,2	2449,2	-1182,9	-1337,2	-87,6	-127,0	-962,9
726,6	258,7	6949,6	104655,2	-456,4	197,1	-3912,0	-399,4	-445,1	-29,2	-42,3	-349,4
23053,0	6949,6	276268,5	5,97E+06	-15659,3	4630,4	232604,4	-12266,0	-14145,9	-926,7	-1343,0	-8925,3
4,20E+05	1,05E+05	5,97E+06	1,55E+08	-310155,1	56099,3	1,04E+07	-2,16E+05	-2,58E+05	-16881,8	-2,45E+04	#######
-1421,5	-456,4	-15659,3	-310155,1	1056,8	-321,5	-6575,5	765,3	872,2	57,2	82,8	597,4
527,2	197,1	4630,4	56099,3	-321,5	182,3	-5508,9	-292,8	-322,8	-21,2	-30,7	-269,6
2449,2	-3912,0	2,33E+05	1,04E+07	-6575,5	-5508,9	1,35E+06	191,5	-1603,0	-101,5	-147,5	7047,8
-1182,9	-399,4	-12266,0	-2,16E+05	765,3	-292,8	191,5	643,1	725,0	47,5	68,9	531,3
-1337,2	-445,1	-14145,9	-2,58E+05	872,2	-322,8	-1603,0	725,0	819,8	53,7	77,9	589,7
-87,6	-29,2	-926,7	-16881,8	57,2	-21,2	-101,5	47,5	53,7	3,5	5,1	38,7
-127,0	-42,3	-1343,0	-24466,3	82,8	-30,7	-147,5	68,9	77,9	5,1	7,4	56,0
-962,9	-349,4	-8925,3	-124931,0	597,4	-269,6	7047,8	531,3	589,7	38,7	56,0	474,3

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 1,20 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 6024,10$ 

V.13 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Weibull com Vetor de Desvios padrão C. Estimação de Parâmetros empregando Reconciliação de Dados

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

```
[1,50; 3,50] h^{-1}
                                                                     [0,500; 1,50] h^{-1}
k_1:
                                                          k_2:
             [1100; 1300] \text{ kg/m}^3
                                                                     [0,900; 2,90] h
(C_{A0})_1:
                                                           \Theta_1:
(C_{A0})_2:
             [700; 900] \text{ kg/m}^3
                                                          \Theta_2:
                                                                     [0,900; 2,90] h
             [1100; 1300] \text{ kg/m}^3
(C_{A0})_3:
                                                          \Theta_3:
                                                                     [0,001; 0,40] h
             [700; 900] \text{ kg/m}^3
                                                                     [0,001; 0,40] h
(C_{A0})_4:
                                                          \Theta_4:
             [ 900; 1100] kg/m<sup>3</sup>
                                                          \Theta_5:
                                                                     [0,500; 1,50] h
(C_{A0})_5:
```

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$k_1$	$k_2$	$(C_{A\theta})_1$	$(C_{A0})_2$	$(C_{A0})_3$	$(C_{A0})_4$	$(C_{A0})_5$	$\Theta_1$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\Theta_4$	$\Theta_5$
22,90	12,43	-1400,45	2425,98	230,02	-199,67	2281,69	-14,84	-36,87	-1,03	-1,23	-15,60
12,43	7,40	-771,65	869,35	133,07	-90,89	2182,86	-8,73	-17,97	-0,55	-0,67	-10,60
-1400,45	-771,65	85847,6	-140452,1	-14211,9	11903,5	-156196,2	919,1	2218,66	62,8	75,6	991,6
2425,98	869,35	-140452,1	596491,8	16153,9	-35388,8	-440933,3	-1105,1	-5512,51	-110,9	-127,7	-122,5
230,02	133,07	-14211,9	16153,9	2643,5	-1604,8	37549,4	-157,6	-328,57	-10,4	-12,5	-188,9
-199,67	-90,89	11903,5	-35388,8	-1604,8	2438,9	7811,9	111,1	390,27	9,0	10,6	74,2
2281,69	2182,86	-156196,2	-440933,3	37549,4	7811,9	1632203,7	-2462,3	-493,57	-96,1	-129,3	-4713,5
-14,84	-8,73	919,12	-1105,05	-157,56	111,10	-2462,28	10,32	21,75	0,66	0,80	12,33
-36,87	-17,97	2218,66	-5512,51	-328,57	390,27	-493,57	21,75	67,05	1,66	1,97	18,01
-1,03	-0,55	62,77	-110,94	-10,41	8,98	-96,15	0,66	1,66	0,05	0,06	0,69
-1,23	-0,67	75,59	-127,68	-12,48	10,62	-129,33	0,80	1,97	0,06	0,07	0,86
-15,60	-10,60	991,56	-122,54	-188,86	74,22	-4713,49	12,33	18,01	0,69	0,86	17,73

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 1,20 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\odot}) = 6024,10$ 

V.14 Dados pseudoexperimentais proveniente de Distribuição de Probabilidade Weibull com Vetor de Desvios padrão D. Estimação de Parâmetros empregando Reconciliação de Dados

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

			1 5
$k_1$ :	$[0,80; 3,50] \text{ h}^{-1}$	$k_2$ :	$[0,05; 10,0] \text{ h}^{-1}$
$(C_{A0})_1$ :	$[900; 1500] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_1$ :	[0,800; 3,00] h
$(C_{A0})_2$ :	$[400; 1200] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_2$ :	[0,800; 3,00] h
$(C_{A0})_3$ :	$[900; 1500] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_3$ :	[0,001; 0,40] h
$(C_{A0})_4$ :	$[400; 1200] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_4$ :	[0,001; 0,40] h
$(C_{A0})_5$ :	$[800; 1200] \text{ kg/m}^3$	$\Theta_5$ :	[0,300; 1,70] h

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$k_1$	$k_2$	$(C_{A0})_1$	$(C_{A0})_2$	$(C_{A0})_3$	$(C_{A0})_4$	$(C_{A0})_5$	$\Theta_1$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\Theta_4$	$\Theta_5$
56,9	33,6	-27757,3	-311,4	2,1	-10,5	-213,5	-91,3	-110,7	-8,1	-6,1	-79,8
33,6	19,8	-16560,9	-192,8	2,3	-6,1	-118,8	-54,0	-66,3	-4,8	-3,6	-46,5
-27757,3	-16560,9	15770669	165847,1	-14358,2	4968,3	112149,9	46818,8	54908,9	3942,6	2996,4	39464,4
-311,4	-192,8	165847,1	5488,6	-126,3	128,0	-2410,1	516,9	1060,6	44,2	33,7	192,1
2,1	2,3	-14358,2	-126,3	372,1	-149,7	-99,1	-17,1	-5,7	-0,1	-0,4	-9,4
-10,5	-6,1	4968,3	128,0	-149,7	1736,0	-86,3	16,6	29,2	1,2	2,9	9,5
-213,5	-118,8	112149,9	-2410,1	-99,1	-86,3	4483,6	347,6	-32,3	30,4	23,0	550,2
-91,3	-54,0	46818,8	516,9	-17,1	16,6	347,6	148,9	178,9	13,0	9,9	128,3
-110,7	-66,3	54908,9	1060,6	-5,7	29,2	-32,3	178,9	271,5	15,8	12,0	124,5
-8,1	-4,8	3942,6	44,2	-0,1	1,2	30,4	13,0	15,8	1,2	0,9	11,4
-6,1	-3,6	2996,4	33,7	-0,4	2,9	23,0	9,9	12,0	0,9	0,7	8,6
-79,8	-46,5	39464,4	192,1	-9,4	9,5	550,2	128,3	124,5	11,4	8,6	128,9

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 1,80 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 54907,38$ 

V.15 Dados pseudoexperimentais proveniente do Modelo Langmuir com Distribuição de Probabilidade Normal e Vetor de Desvios padrão A. Estimação de Parâmetros empregando Reconciliação de Dados

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

```
[0.80; 5.00] \,\mathrm{h}^{-1}
                                                                          [0.05; 10.0] \,\mathrm{h}^{-1}
k_1:
                                                              k_2:
                                                              \Theta_1:
              [900; 1500] \text{ kg/m}^3
                                                                          [0,800; 3,00] h
(C_{A0})_1:
              [400; 1200] \text{ kg/m}^3
(C_{A0})_2:
                                                              \Theta_2:
                                                                         [0,800; 3,00] h
(C_{A0})_3:
              [900; 1500] \text{ kg/m}^3
                                                                         [0,001; 0,40] h
                                                              \Theta_3:
              [400; 1200] \text{ kg/m}^3
                                                                          [0,001; 0,40] h
(C_{A0})_4:
                                                              \Theta_4:
              [800; 1200] \text{ kg/m}^3
                                                                          [0,300; 1,70] h
(C_{A0})_5:
                                                              \Theta_5:
```

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

								. ,			
$k_1$	$k_2$	$(C_{A\theta})_1$	$(C_{A0})_2$	$(C_{A\theta})_3$	$(C_{A\theta})_4$	$(C_{A0})_5$	$\Theta_1$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\Theta_4$	$\Theta_5$
5,12606	1,43631	-0,03348	-0,04562	0,10279	0,27480	-2,80976	-1,68236	-3,31969	-0,11837	-0,13300	-2,03103
1,43631	0,41236	-0,01127	-0,01590	0,03860	0,08453	-0,65527	-0,47806	-1,05596	-0,03313	-0,03724	-0,54769
-0,03348	-0,01127	7,94561	-0,00617	0,02394	0,00616	-0,01707	0,01182	0,05825	0,00077	0,00100	0,00722
-0,04562	-0,01590	-0,00617	1,00284	-0,02372	0,02594	-0,00889	0,01743	0,06237	0,00108	0,00118	0,01282
0,10279	0,03860	0,02394	-0,02372	0,36513	0,03666	0,00420	-0,04033	-0,15476	-0,00169	-0,00257	-0,03305
0,27480	0,08453	0,00616	0,02594	0,03666	10,71504	-0,05684	-0,09525	-0,26830	-0,00631	-0,00361	-0,09388
-2,80976	-0,65527	-0,01707	-0,00889	0,00420	-0,05684	4,64422	0,83340	-0,08622	0,06505	0,07326	1,45654
-1,68236	-0,47806	0,01182	0,01743	-0,04033	-0,09525	0,83340	0,55826	1,17407	0,03883	0,04363	0,65219
-3,31969	-1,05596	0,05825	0,06237	-0,15476	-0,26830	-0,08622	1,17407	3,93063	0,07637	0,08579	1,00106
-0,11837	-0,03313	0,00077	0,00108	-0,00169	-0,00631	0,06505	0,03883	0,07637	0,00274	0,00307	0,04692
-0,13300	-0,03724	0,00100	0,00118	-0,00257	-0,00361	0,07326	0,04363	0,08579	0,00307	0,00347	0,05275
-2,03103	-0,54769	0,00722	0,01282	-0,03305	-0,09388	1,45654	0,65219	1,00106	0,04692	0,05275	0,86249

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos:

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0.90 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\odot}) = 1379.72$ 

V.16 Dados pseudoexperimentais proveniente do Modelo Langmuir com Distribuição de Probabilidade Normal e Vetor de Desvios padrão B. Estimação de Parâmetros empregando Reconciliação de Dados

Limites estabelecidos para as faixas de Busca no Espaço Paramétrico:

```
[0,50; 7,00] h^{-1}
                                                                         [0.05; 10.0] \,\mathrm{h}^{-1}
k_1:
                                                             k_2:
              [900; 1500] \text{ kg/m}^3
                                                                        [0,800; 3,00] h
(C_{A0})_1:
                                                             \Theta_1:
              [ 400; 1200] kg/m<sup>3</sup>
                                                                        [0,800; 3,00] h
(C_{A0})_2:
                                                             \Theta_2:
(C_{A0})_3:
              [900; 1500] \text{ kg/m}^3
                                                                        [0,001; 0,40] h
                                                             \Theta_3:
              [400; 1200] \text{ kg/m}^3
(C_{A0})_4:
                                                             \Theta_4:
                                                                        [0,001; 0,40] h
              [800; 1200] \text{ kg/m}^3
                                                                        [0,300; 1,70] h
(C_{A0})_5:
                                                             \Theta_5:
```

Faixa da Grade experimental  $C_{A0}$ : [800; 1200] kg/m<sup>3</sup>  $\Theta$ : [0,10; 1,90] h

Número de pontos em  $C_{A0}$ : 21 Número de pontos em  $\Theta$ : 19

Matriz covariância paramétrica calculada numericamente a partir da Equação (D.8):

$k_1$	$k_2$	$(C_{A0})_1$	$(C_{A0})_2$	$(C_{A0})_3$	$(C_{A0})_4$	$(C_{A0})_5$	$\Theta_1$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\Theta_4$	$\Theta_5$
1621,0	370,7	-45862,2	-1505,6	4860,2	-1821,8	23488,4	-239,1	-622,1	-26,3	-17,3	-617,2
370,7	91,4	-11988,7	1370,1	856,4	-424,3	4262,2	-56,1	-199,7	-6,1	-4,0	-132,0
-45862,2	-11988,7	1640374,4	-345890,2	-79715,7	53474,2	-412944,8	7074,8	30622,3	759,6	492,2	15392,5
-1505,6	1370,1	-345890,2	447080,1	-71206,3	-244,3	-309638,9	-133,7	-14350,3	8,0	14,7	2951,7
4860,2	856,4	-79715,7	-71206,3	26104,1	-4985,7	113385,0	-663,5	366,7	-76,1	-51,8	-2207,2
-1821,8	-424,3	53474,2	-244,3	-4985,7	3754,6	-25152,7	270,2	764,4	29,8	20,2	683,3
23488,4	4262,2	-412944,8	-309638,9	113385,0	-25152,7	527365,2	-3234,8	629,9	-371,2	-250,4	-10480,1
-239,1	-56,1	7074,8	-133,7	-663,5	270,2	-3234,8	35,6	103,7	3,9	2,6	89,2
-622,1	-199,7	30622,3	-14350,3	366,7	764,4	629,9	103,7	738,9	10,7	6,7	157,2
-26,3	-6,1	759,6	8,0	-76,1	29,8	-371,2	3,9	10,7	0,4	0,3	9,9
-17,3	-4,0	492,2	14,7	-51,8	20,2	-250,4	2,6	6,7	0,3	0,2	6,6
-617,2	-132,0	15392,5	2951,7	-2207,2	683,3	-10480,1	89,2	157,2	9,9	6,6	247,8

Ponto Experimental adicional sugerido pelo Algoritmo de Planejamento Seqüencial de Experimentos:  $C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0.70 \text{ h}$   $tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 30411.94$ 

$$C_{A0} = 1200 \text{ kg/m}^3 \text{ e } \Theta = 0.70 \text{ h}$$
  $tr(\mathbf{V}_{\phi}) = 30411.94$ 

# APÊNDICE VI: ALGORITMO DE DIMENSIONAMENTO DE DUTO E DE BOMBAS.

Tabela VI.1: Dados de entrada utilizados na execução do algoritmo de dimensionamento do duto e bombas.

Variável	Valor	Unidade
Temperatura de projeto	25	°C
Temperatura de projeto	23	C
Diferença de cota entre os pontos de sucção e recebimento de		
bombeio		
bonnocio		
	500	m
Altura de coluna de líquido no tanque de envio	18	ft
Altura de coluna de líquido no tanque de envio	40,5	ft
NPSH requerido pela primeira bomba	30	m
Pressão de vapor verdadeira do petróleo	12,2	psia
Velocidade máxima admissível de sucção por um tubo	6,0	ft/s
Velocidade máxima admissível de descarga por um tubo	8,0	ft/s
Diferença de cota entre tanque de envio e a bomba	20	m
Espessura mínima de um tubo, será usado para sucção	0,281	in
Extensão do duto de sucção até a primeira bomba	700	m
Rotação nominal das bombas	1750	rpm
Número de estágios nas bombas centrífugas #1 e #2	4	
Número de estágios nas bombas centrífugas #3	2	
Sobre-espessura de corrosão	1,2	mm
Tempo de vida do projeto	30	anos
Número de dias disponíveis para operação no ano	350	
Refino	200.000	bbl/dia
tempo de polegada para troca de tanques	2	h
tempo de repouso	24	h
Tempo de interrupção do duto	12	h
Tempo máximo para recuperar estoque	72	h
Capacidade operacional de um tanque	311.400	bbl
Capacidade nominal de um tanque	379.400	bbl
Capacidade total de um tanque	352.400	bbl
Juro de penalização do custo de estoque	2,5	%a.a.
PARÂMETROS DO MÉTODO DE ENXAME DE P.		S
Número máximo de iterações	600	
Número de partículas	700	
Parâmetro C <sub>1</sub>	1,8	
Parâmetro C <sub>2</sub>	2,0	
Parâmetro w <sub>0</sub>	1,2	
Parâmetro w <sub>f</sub>	0,1	
tolerância	1 x 10 <sup>-4</sup>	
FAIXA DE BUSCA DA MISTURA DE PETRÓLE		
Faixa de busca do petróleo A	0,0	
_	1,0	
Faixa de busca do petróleo B	0,0	
_	1,0	
Faixa de busca do petróleo C	0,0	
•	0,3	
Faixa de busca do petróleo D	0,0	
•	0,4	

```
Início
Dado Q
Sorteie uma composição X
Lucro = -10^{300}
Tol = 1 \times 10^{-8}
Erro = 1.0
ENQUANTO Erro < Tol
Busca X pelo Método do Enxame de particulas
Calcula Rendimentos, Teores de acidez e Enxofre
SE Rendimentos, Teores de acidez e Enxofre atendem restrições
     Calcula PROJETO DE BOMBA E DUTO(X,D, esp, Material, Head, Potência, Estoque)
     Calcula LUCRO = Renda Bruta(X) - Custo(X, D, esp, Material, Head, Potência, Estoque)
SENÃO
     Lucro = -10^{300}
FIM SE
FIM ENQUANTO
Xglobal = X
Dglobal = D
esp\_global = esp
Materialglobal = Material
Head\_global = Head
Potência_global = Potência
Estoque\_global = Estoque
SUBROTINA PROJETO DE BOMBA E DUTO(X,D, esp, Material, Head, Potência, Estoque)
!DIMENSIONAMENTO DO TRECHO DA TUBULAÇÃO DE SUCÇÃO
Pmax_succao=(57d0+Dif_alt_suc)*62.371d0/144d0 !lbf/in2(psig) Massa específica da água @ 60F = 62.371 lb/ft3
Custo d min=4d300
dmin=0
!Loop de busca do diâmetro, espessura e material ótimo
PARA i=1, ..., 222
                     !Visita todos os diâmetros
         Area_int=pi*DI(i)^2/4d0/144d0!ft^2
        Vel=Q*1.333680556d-1/6d1/Area_int !v=Q/A [gal/min/ft^2] => ft/s
        SE (Vel>V_suc_max) ENTÃO !Se velocidade for alta, aumenta-se o DI
                 CYCLE
        FIM SE
        SE (esp<esp_min) ENTÃO !Se espessura é fina, aumenta-se a espessura da parede
        FIM SE
        Re=Vel*DI(i)/Visc*12d0*25.4d0*25.4d0
        Calcula FATOR DE ATRITO(Re, DI, f)
        k_suc=5.7d-1+44d0*f
        Leq_suc=316d0 !Comprimento equivalente de sucção [ft]
        Perda_carga_suc=(k_suc+f*(Leq_suc+L_suc)/DI*12d0)*Vel*Vel/2d0/32.1740486d0 !ft
        NPSHd=(2d0*14.6959488-PVap)*144d0/62.371d0+Dif_alt_suc-Perda_carga_suc !ft de água @ 60F
        SE (NPSHd < NPSHreq) ENTÃO
                 ESCREVE('NPSH disponivel < NPSH req')
                 CYCLE
        FIM SE
        Custo\_j\_min1 = 10^{300}
        Custo_j_min2=10300
        j_min1=0
```

```
j_min2=0
                   Classe_p = 0
                   PARA j = 1,..., 9
                                        !Cálculo da espessura
                                       t_PSL1=DN/2d0*(1d0-DSQRT((Custo_tubo(j,1)*1d3 - Pmax_succao)/ (Custo_tubo(j,1)*1d3 +
Pmax succao)))
                                       t\_PSL2 = DN/2d0*(1d0-DSQRT((Custo\_tubo(j,2)*1d3-Pmax\_succao / (Custo\_tubo(j,2)*1d3 + Pmax\_succao / (Custo\_tubo(j,2)*1d3 
Pmax_succao)))
                                       SE (esp>=t_PSL1) ENTÃO
                                                           Custo_suc1=Massa_linear*L_suc*Custo_tubo(j,3)
                                       SENÃO
                                                           Custo_suc1=8d200
                                       FIM SE
                                       SE (esp>=t_PSL2) ENTÃO
                                                           Custo_suc2=Massa_linear*L_suc*Custo_tubo(j,4)
                                       SENÃO
                                           Custo_suc2=8d200
                                       FIM SE
                                       !Teste para registrar os mínimos
                                       SE(Custo_suc1<Custo_j_min1) ENTÃO
                                                           Custo\_j\_min1 = Custo\_suc1
                                                           j_min1=j
                                       FIM SE
                                       SE (Custo_suc2<Custo_j_min2) ENTÃO
                                                           Custo_j_min2=Custo_suc2
                                                           j_min2=j
                                       FIM SE
                   FIM PARA
                   SE(Custo_j_min1<=Custo_j_min2) ENTÃO
                                       Custo_i_min=Custo_j_min1
                                       indice_j=j_min1
                                       Classe\_p{=}1
                   SENÃO
                                       Custo_i_min=Custo_j_min2
                                       indice_j=j_min2
                                       Classe_p=2
                   FIM SE
!TESTE DE MÍNIMO GLOBAL
                   SE (Custo_i_min<Custo_d_min) ENTÃO
                                       Custo_d_min=Custo_i_min
                                       dmin_suc=i
                                       Classe_p_min_suc=Classe_p
                                       indice_j_suc=indice_j
                                       Vel_min_suc=Vel
                                       Re_min_suc=Re
                                       NPSHd_min=NPSHd
                                       Perda_carga_suc_min=Perda_carga_suc
                                       f_min_suc=f
                   FIM SE
FIM PARA
Custo_duto_suc=Custo_d_min
!DIMENSIONAMENTO DO TRECHO DA TUBULAÇÃO DE DESCARGA E DO SISTEMA DE BOMBA
!Loop de busca do diâmetro, espessura e material ótimo
Custo_i_min=10<sup>300</sup>
Custo_duto_min=10300
dmin=0
PARA i=1, ..., 222 !Visita todos os diâmetros
                   Area_int=pi* DI(i)<sup>2</sup>/4d0/144d0 !ft^2
                    Vel=Q*1.333680556d-1/6d1/Area_int !v=Q/A [gal/min/ft^2] => ft/s
```

```
SE (Vel>V desc max) ENTÃO !Se velocidade for alta, aumenta-se o DI
                      CYCLE
FIM SE
SE (esp<esp_min) ENTÃO !Se espessura é fina, aumenta-se a espessura da parede
                      CYCLE
FIM SE
Re=Vel*DI(i)/Visc*12d0*25.4d0*25.4d0
Calcula FATOR DE ATRITO(Re, DI, f)
k_desc=1.32d0+337d0*f
Leq_desc=1.08d3 !Comprimento equivalente de sucção [ft]
Perda\_carga\_desc=(k\_desc+f*(Leq\_desc+L\_duto)/DI(i)*12d0)*Vel*Vel/2d0/32.1740486d0 !ft = (k\_desc+f*(Leq\_desc+L\_duto)/DI(i)*12d0)*Vel*Vel/2d0/32.1740486d0 !ft = (k\_desc+f*(Leq\_desc+L\_duto)/DI(i)*Id0/2d0/32.1740486d0 !ft = (k_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq\_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_desc+f*(Leq_d
!Cálculo do HEAD TOTAL NECESSÁRIO DA BOMBA
!Hbomba=Deltaz + hs + hduto +Delta_liquido
Head_b_total_visc=(Cota+Perda_carga_suc_min+Perda_carga_desc+Alt_Tk2-Alt_Tk1)*Dens !ft de água
!Cálculo do head viscoso para cada uma das 3 bombas em série. Por simplificação, bombas 1 e 2 sáo
!são clones e portanto basta calcular apenas uma delas
Head b_visc(1)=Head_b_total_visc/5d0*2d0
Head_b_visc(2)=Head_b_total_visc/5d0
!Cálculo do head viscoso por estágio
Head_estagio_visc(1)=Head_b_visc(1)/N_estagio_1 !Bomba 1 é idêntica a bomba 2
Head_estagio_visc(2)=Head_b_visc(2)/N_estagio_3 !Bomba 3 tem metade do head das outras
!Cálculo do Head e capacidades (vazao) das bombas na condicao de performance com agua
PARA k=1,2
                     Calcula Performance_agua(Vazao_proj, Head_estagio_visc(k), Visc,Q_agua(k),
                     Head_agua_est(k), Fator(1,k),Fator(2,k),Fator(3,k),Fator(4,k),Fator(5,k),Fator(6,k))
                      !Cálculo da velocidade específica Ns
                     Ns(k)=Rotacao*DSQRT(Q_agua(k))/(Head_agua_est(k))**(0.75d0)
                      !Cálculo da Eficiência BEP em performance com água
                     Calcula Eficiencia_BEP(Ns(k),Q_agua(k),Ef_BEP(k))
FIM PARA
!Cálculo da Potência BEP em performance com água
Potencia_BEP_agua(1)=N_estagio_1*Head_agua_est(1)*Q_agua(1)*62.371d0/6d1/144d0*&
                             6.89475729*3.78541178*1d-6/Ef_BEP(1) !Megawatts
Potencia_BEP_agua(2)=N_estagio_3*Head_agua_est(2)*Q_agua(2)*62.371d0/6d1/144d0*&
                             6.89475729*3.78541178*1d-6/Ef_BEP(2) !Megawatts
Head_BEP(1)=Head_agua_est(1)*N_estagio_1
Head_BEP(2)=Head_agua_est(2)*N_estagio_3
PARA k=1,2
                     Potencia_BEP_vis(k)=Potencia_BEP_agua(k)/Fator(1,k)
                      !Matriz recebe Head da curva de performance das bombas com água
                     Calcula Curva_bomba_perf_agua(Ns(k), Ef_BEP(k), Head_BEP(k), Potencia_BEP_agua(k),
                     Curva_eficiencia_agua(:,k),Curva_Head_agua(:,k),Curva_Pot_agua(:,k))
FIM PARA
!CÁLCULO DA PRESSÃO DE DESCARGA DE PROJETO
Pressao_desc_proj=(57d0+Dif_alt_suc-Perda_carga_suc_min+Head_b_total_visc)*62.371d0/144d0 !psig
!CÁLCULO DA PRESSÁO MÁXIMA DE OPERAÇÃO a 25% da vazão BEP
Curva_Head_agua(2,2)) *62.371d0/144d0 !psig
!CÁLCULO DO INVESTIMENTO PARA COMPRA E INSTALAÇÃO DAS BOMBAS
Invest\_Bombas = 1.2d6*(2d0*DSQRT(Head\_BEP(1)/675d0)*(Q\_agua(1)/7.3d3)**(0.35d0) + (0.35d0)*(Q\_agua(1)/7.3d3)**(0.35d0) + (0.35d0)*(Q\_agua(1)/7.3d3)**(0.35d0)*(Q\_agua(1)/7.3d3)**(0.35d0)*(Q\_agua(1)/7.3d3)**(0.35d0)*(Q\_agua(1)/7.3d3)**(0.35d0)*(Q\_agua(1)/7.3d3)**(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.35d0)*(0.3
```

DSQRT(Head\_BEP(2)/675d0) \*(Q\_agua(2)/7.3d3)\*\*(0.35d0)) !USD

```
!CÁLCULO DO CUSTO OPERACIONAL DE CONSUMO DE ENERGIA ELÉTRICA
Calcula CONSUMO_ENERGIA(Vazao_proj,Potencia_BEP_vis,Custo_energia)
!CÁLCULO DO CUSTO DE MÃO-DE-OBRA
Mao\_de\_obra = 1.85d5 + ((213.1d0*DN + 426.9d0)*DN + 1.67522d4)*L\_duto1
!CÁLCULO DO CUSTO DE MISCELÂNEA
Miscelanea=9.5d4+(5.2301d3*DN+4.5509d3)*L_duto1
!CÁLCULO DO RIGHT OF WAY
Right_of_way=4d4+(358.4d0*DN+1.85094d4)*L_duto1
!SUBTOTAL
Sub\_total = Invest\_Bombas + Custo\_energia + Mao\_de\_obra + Miscelanea + Right\_of\_way \ !
Custo_j_min1=9d200
Custo_j_min2=9d200
j_min1=0
j_min2=0
Classe_p=0
PARA j = 1,..., 9
        !CÁLCULO DA ESPESSURA DO TUBO
        t_PSL1=DN/2d0*(1d0-DSQRT((Custo_tubo(j,1)*1d3 - Pressao_max_desc)/(Custo_tubo(j,1)
              *1d3 + Pressao_max_desc))) + Sobre_esp/25.4d0 !Sobre-espessura para corrosão
        t_PSL2=DN/2d0*(1d0-DSQRT((Custo_tubo(j,2)*1d3-Pressao_max_desc) / (Custo_tubo(j,2)*1d3
              + Pressao_max_desc))) + Sobre_esp/25.4d0 !Sobre-espessura para corrosão
        SE (esp>=t_PSL1) ENTÃO
                 Custo_suc1=Massa_linear*L_duto*Custo_tubo(j,3)
        SENÃO
                 Custo\_suc1 = 10^{300}
        FIM SE
        SE(esp>=t_PSL2) ENTÃO
                 Custo_suc2=Massa_linear*L_duto*Custo_tubo(j,4)
        SENÃO
          Custo_suc2= 10<sup>300</sup>
        FIM SE
        !Teste para registrar os mínimos
        SE (Custo_suc1<=Custo_j_min1) ENTÃO
                 Custo_j_min1=Custo_suc1
                j_min1=j
        FIM SE
        SE(Custo_suc2<=Custo_j_min2) ENTÃO
                 Custo_j_min2=Custo_suc2
                j_min2=j
        FIM SE
FIM PARA
SE(Custo_j_min1<=Custo_j_min2) ENTÃO
        Custo_i_min=Custo_j_min1
        indice_j=j_min1
        Classe\_p=1
SENÃO
        Custo_i_min=Custo_j_min2
        indice_j=j_min2
        Classe_p=2
FIM SE
Custo_duto=Custo_i_min+Sub_total
!TESTE DE MÍNIMO GLOBAL
SE(Custo_duto<Custo_duto_min) ENTÃO
        Custo_duto_min=Custo_duto
        Custo\_tubul = Custo\_i\_min
        dmin_desc=i
```

```
Classe p min desc=Classe p
                Vel_min_desc=Vel
                indice_j_desc=indice_j
                Re min desc=Re
                Perda_carga_desc_min=Perda_carga_desc
                f min desc=f
                Head b visc min=Head b visc
                Head_BEP_min=Head_BEP
                Q_agua_min=Q_agua
                Fator_min=Fator
                Ns_min=Ns
                Ef_BEP_min=Ef_BEP
                Potencia_BEP_agua_min=Potencia_BEP_agua
                Potencia_BEP_vis_min=Potencia_BEP_vis
                Curva_eficiencia_agua_min=Curva_eficiencia_agua
                Curva_Head_agua_min=Curva_Head_agua
                Curva_Pot_agua_min=Curva_Pot_agua
                Pressao_desc_proj_min=Pressao_desc_proj
                Pressao_max_desc_min=Pressao_max_desc
                Invest Bombas min=Invest Bombas
                Custo_energia_min=Custo_energia
                Mao_de_obra_min=Mao_de_obra
                Miscelanea min=Miscelanea
                Right_of_way_min=Right_of_way
        FIM SE
FIM PARA
SE (dmin_desc==0) ENTÃO
  DI_proj = -1,0
SENÃO
        DI_proj=Esp_tubo(dmin_desc,3)
FIM SE
FIM SUBROTINA PROJETO DE BOMBA E DUTO(
SUBROTINA Fator Atrito(Re,D,f)
SUBROTINA PARA CALCULAR COEFICIENTE DE ATRITO A PARTIR DO NÚMERO DE REYNOLDS E!
RUGOSIDADE
!Equação de COLEBROOK-WHITE [LUDWIG, 1999, p.68]
![1/sqrt(f)] = log10\{e/(3.7D)+2.51/[Re.sqrt(f)]\}
tol=1d-7 !tolerância adotada
perturb=1d-10 !perturbação adotada
f=3.2d-2 !Estimativa inicial
e_D=3d-3/(D*2.54d0) !Rugosidade absoluta adotada = 30x10^(-6) m de acordo Tabela 2.4 de STUCKENBRUCK,
2009,p.2.15
          !STUCKENBRUCK, S., "Escoamento de Líquidos e gases em dutos", In: Engenharia de Dutos, org.
                                         !José Luiz de França Freire, 1 ed., Rio de Janeiro: ABCM -
Associação Brasileira de Engenharia
                                         !e Ciências Mecânicas
i=0
 !Seção que usa o resultado do ponto ótimo obtido pelo Método do Enxame implementado
 !acima e refina-o empregando o Método de Newton_Raphson proposto por Schaab & Pinto
 !no Livro Análise de Dados Experimentais I: Fundamentos de Estatística e Estimação
 !de Parâmetros, pg. 323-330.
2 Func0=1d0/DSQRT(f)+2d0*DLOG10(e_D/3.7d0+2.51d0/(Re*DSQRT(f)))
 f1=f+perturb
 Func1=1d0/DSQRT(f1)+2d0*DLOG10(e D/3.7d0+2.51d0/(Re*DSQRT(f1)))
 f1=f-2*perturb
 Func2=1d0/DSQRT(f1)+2d0*DLOG10(e_D/3.7d0+2.51d0/(Re*DSQRT(f1)))
 f1=f+perturb
 Der=(Func1-Func2)/(2d0*perturb)
```

```
f=f-Func0/Der
 Func3=1d0/DSQRT(f)+2d0*DLOG10(e_D/3.7d0+2.51d0/(Re*DSQRT(f)))
 erro=ABS(Func1-Func3)
SE (erro>tol) ENTÃO
        VAI PARA 2
SENÃO
        i=i+1
        SE (i>800) ENTÃO
                 ESCREVA( 'Excedido número de iteracoes p/ encontrar Fator atrito' )
FIM SE
FIM SUBROTINA
SUBROTINA Correcao_performance_viscosidade(Qw,Hw,Visc,CE,CQ,CH_60,CH_80,CH_100,CH_120)
!EQUAÇÕES BASEADAS NO GRÁFICO DE CONRREÇÃO DE PERFORMANCE VISCOSA 3.56 DO
LUDWIG,1999, PG.204.
                 !Vazao na condicao de performance com água [gpm]
Qw
                 !Variavel X referente a transformação da Vazão em transformação da unidade [gpm] para escala
                 do gráfico
                 !Head do primeiro estágio da bomba [ft]
Hw
YΗ
                 !ordenada da equação de Head
XV
                 !abcissa da equação de viscosidade
                 !viscosidade cinemática [cSt]
Visc
CE
                 !Fator de correção de Eficiência da Bomba
                 !Fator de correção de Capacidade da bomba
CQ
CH_60
                 !Fator de correção de Head 60%Qn
CH_80
                 !Fator de correção de Head 80% Qn
CH_100
                 !Fator de correção de Head 100% Qn
                 !Fator de correção de Head 120%Qn
CH_120
!Transformação de Ow em abcissa do gráfico
X=2.50235163025103d0*DLOG(Qw)-11.5328556469413d0
!Equação para encontrar a ordenada das curvas de Head
YH=0.627524663d0*DLOG(Hw)-0.738684178d0+0.485782788135729d0*X
!Equação para encontrar a abcissa das curvas de Viscosidade
XV=1.24755585d0*DLOG(Visc)+2.02479641d0-0.498808930440717d0*YH
!Cálculo do Fator de correção de Eficiência
CE=100.359694d-2-((0.0758475757d-2*XV+0.236582203d-2)*XV+1.02031634d-2)*XV
!Cálculo do Fator de correção de Capacidade (Vazão)
CQ=100.712205d-2+((-0.17633784d-2*XV+1.39531583d-2)*XV-2.78122069d-2)*XV
SE (CQ > 1d0) ENTÃO
        CQ=1d0
!Cálculo do Fator de correção de Head 60% Qn
SE (XV<1.75d0) ENTÃO
        CH_60=1d0
SENÃO
        SE (XV<=3.45d0) ENTÀO
                 CH_60=1d0-3.53d-3*(XV-1.75d0)
        SENÃO
                 CH_60=8.38545899d-1+(-8.07094428d-3*XV+6.94839863d-2)*XV
        FIM SE
FIM SE
!Cálculo do Fator de correção de Head 80% Qn
SE (XV<1.75d0) ENTÀO
        CH_80=1d0
SENÃO
```

```
SE (XV<=2.75d0) ENTÃO
                                   CH_80=1d0-6.45d-3*(XV-1.75d0)
                 SENÃO
                                   CH_80=8.82775852d-1+(-7.70071411d-3*XV+5.67607477d-2)*XV
                 FIM SE
FIM SE
 !Cálculo do Fator de correção de Head 100% Qn
SE (XV<1.75d0) ENTÃO
                 CH_100=1d0
SENÃO
                 SE (XV<=2.75d0) ENTÃO
                                   CH_100=1d0-1.29d-2*(XV-1.75d0)
                 SENÃO
                                   SE (XV<=3.45d0) ENTÃO
                                                     CH_100=1d0-9.21d-3*(XV-2.75d0)
                                   SENÃO
                                                     CH_100=8.92660673d-1+(-7.76692246d-3*XV+5.22996279d-2)*XV
                                   FIM SE
                 FIM SE
FIM SE
!Cálculo do Fator de correção de Head 120% Qn
SE (XV<1.75d0) ENTÃO
                 CH_120=1d0
SENÃO
                 SE (XV<=2.75d0) ENTÃO
                                   CH_120=1d0-1.935d-2*(XV-1.75d0)
                 SENÃO
                                   SE (XV<=3.45d0) ENTÃO
                                                     CH_120=1d0-1.964d-2*(XV-2.75d0)
                                   SENÃO
                                                     CH_120=8.73963682d-1+(-8.57464812d-3*XV+5.65206646d-2)*XV
                                   FIM SE
                 FIM SE
FIM SE
FIM SUBROTINA Correcao_performance_viscosidade
SUBROTINA Consumo_energia(Q,Potencia,Custo_total1)
Tempo_util_duto=Refino*Tempo_vida*Dias_ano/Q*24d0 !horas
Dias_Fins_semana=104d0-(365d0-Dias_ano-1d0)/7d0*2d0 !dias
Dias_uteis=Dias_ano-Dias_Fins_semana!dias
Horas_horo=Dias_uteis*3d0*Tempo_vida !horas
Horas_normal=(Dias_uteis*21d0+Dias_Fins_semana*24d0)*Tempo_vida !horas
SE (Tempo_util_duto<=Horas_normal) ENTÃO !Tempo total menor do que total de horas de tarifa normal
                 Custo_total1=Tarifa_normal*(2d0*Potencia(1)+Potencia(2))/0.95d0*Tempo_util_duto !USD
SENÃO
                 Custo\_total1 = (2d0*Potencia(1) + Potencia(2))/0.95d0*(Horas\_normal*Tarifa\_normal + Tarifa\_horo*\& (Horas\_normal*Tarifa\_normal + Tarifa\_horo*\& (Horas\_normal*Tarifa\_normal + Tarifa\_horo*\& (Horas\_normal + Tarifa\_normal + Tarifa\_horo*\& (Horas\_normal + Tarifa\_normal + Tarifa\_horo*\& (Horas\_normal + Tarifa\_normal + Tarifa\_horo*\& (Horas\_normal + Tarifa\_horo*\& (Horas\_normal + Tarifa\_normal + Tarifa\_horo*\& (Horas\_normal + Tarifa\_h
                           (Tempo_util_duto-Horas_normal)) !USD
FIM SE
FIM SUBROTINA Consumo_energia
SUBROTINA Curva_bomba_perf_agua(Ns, Ef_BEP,Head_BEP, Pot_BEP,Curva_eficiencia_agua,
Curva_Head_agua, Curva_Pot_agua)
 !CÁLCULO DA CURVA DE EFICIÊNCIA
X=1.57470907d0*DLOG(Ns)-10.0786351d0
C Eficiencia Q25=52.8880597d-2-(0.362797417d-2*X+3.10571696d-2)*X
C_Eficiencia_Q50=79.601376d-2-(0.372684991d-2*X+1.66774379d-2)*X
C_Eficiencia_Q75=95.2379196d-2-(0.228525816d-2*X+0.469382414d-2)*X
C_Eficiencia_Q110=99.6818696d-2+(0.0955599116d-2*X-1.01174503d-2)*X
Curva_eficiencia_agua(1,1)=0d0
```

```
Curva eficiencia agua(2,1)=C Eficiencia O25*Ef BEP
Curva_eficiencia_agua(3,1)=C_Eficiencia_Q50*Ef_BEP
Curva_eficiencia_agua(4,1)=C_Eficiencia_Q75*Ef_BEP
Curva_eficiencia_agua(5,1)=Ef_BEP
```

Curva\_eficiencia\_agua(6,1)=C\_Eficiencia\_Q110\*Ef\_BEP

#### !CÁLCULO DA CURVA DE HEAD

X=2.30013131d0\*DLOG(Ns)-14.7242087d0

Y0=(0.128825117d0\*X-0.202375579d0)\*X+1.91341148d0

Y25=(0.0838734372d0\*X-0.0571911166d0)\*X+1.86682106d0

Y50=(0.0575224996d0\*X-0.0348882954d0)\*X+1.95136571d0

Y75=(0.03224072d0\*X-0.0198532d0)\*X+1.85432519d0

Y110=((-0.00548244171\*X+0.0311338067d0)\*X-0.0881662864d0)\*X+1.31538727d0

Curva\_Head\_agua(1,1)=70.7628076d-2\*DEXP(0.225198683d0\*Y0)\*Head\_BEP

Curva Head agua(2,1)=70.7628076d-2\*DEXP(0.225198683d0\*Y25)\*Head BEP

Curva\_Head\_agua(3,1)=70.7628076d-2\*DEXP(0.225198683d0\*Y50)\*Head\_BEP

Curva\_Head\_agua(4,1)=70.7628076d-2\*DEXP(0.225198683d0\*Y75)\*Head\_BEP

Curva Head agua(5,1)=Head BEP

Curva\_Head\_agua(6,1)=70.7628076d-2\*DEXP(0.225198683d0\*Y110)\*Head\_BEP

#### !CÁLCULO DA CURVA DE POTÊNCIA

X=1.5673185d0\*DLOG(Ns)-10.0257112d0

Y0=(0.0718237758d0\*X+0.319154985d0)\*X+0.207169739d0

Y25=(0.0821982464d0\*X+0.0497943497d0)\*X+0.870234407d0

Y50=(0.0500802034d0\*X+0.0283269762d0)\*X+1.28649169d0

Y75=(0.0286822093d0\*X-0.00287108382d0)\*X+1.60543068d0

Y110=1.94470773d0-((0.00742550306d0\*X-0.0281764421d0)\*X+0.0534863834d0)\*X

Curva\_Pot\_agua(1,1)=30.0623581d-2\*DEXP(0.649215764d0\*Y0)\*Pot\_BEP

Curva\_Pot\_agua(2,1)=30.0623581d-2\*DEXP(0.649215764d0\*Y25)\*Pot\_BEP

Curva\_Pot\_agua(3,1)=30.0623581d-2\*DEXP(0.649215764d0\*Y50)\*Pot\_BEP

Curva\_Pot\_agua(4,1)=30.0623581d-2\*DEXP(0.649215764d0\*Y75)\*Pot\_BEP

Curva\_Pot\_agua(5,1)=Pot\_BEP

Curva\_Pot\_agua(6,1)=30.0623581d-2\*DEXP(0.649215764d0\*Y110)\*Pot\_BEP

FIM SUBROTINA Curva\_bomba\_perf\_agua

SUBROUTINE Calcula\_lucro(Composicao\_vol,Vazao\_proj,n\_pet,Lucro)

#### !COTAÇÃO DE AQUISICAO DA MATÉRIA-PRIMA

Cotacao MP=Composicao\_vol(1)\*Propriedade(23,1)+Composicao\_vol(2)\*Propriedade(23,2)+Composicao\_vol(3)\* Propriedade(23,3)+Composicao\_vol(4)\*Propriedade(23,4)

!custo operacional

Despesa\_operacional=2.4d6\*12d0\*Tempo\_vida !Custo operacional/ano

!Cálculo de Estoque

t\_preparo=t\_troca+t\_repouso+Cap\_Op/Vazao\_proj\*42d0/6d1 !h

D\_estoque\_preparo=t\_preparo\*Refino\*6d1/42d0 !bbl

D\_estoque\_interrup=tinterrup\*Refino\*6d1/42d0 !bbl

t\_recup=D\_estoque\_interrup/(Vazao\_proj-Refino)\*42d0/6d1 !h

SE (t\_recup>t\_recup\_max) ENTÃO

Estoque min=D estoque preparo+D estoque interrup-(Vazao proj-Refino)\*t recup max\*6d1/42d0

SENÃO

Estoque\_min=D\_estoque\_preparo

FIM SE

Estoque medio=Estoque min+Cap Op\*5d-1

!Caso estoque medio seja apropriado para apenas 3 tanques

 $N_tq=0$ 

!CÁLCULO DO INVESTIMENTO PARA TANCAGEM

```
!CONTABILIZANDO 1 TO RECEBENDO
                                                                                                                                                                                                                   1/2 Capac. Total
                                1
                                                                      1 TQ REPOUSO
                                                                                                                                         1 Capac. Total
                                                                     1 TQ ENVIANDO
                                ١
                                                                                                                                              1/2 Capac. Total
                                                                     1 TQ MANUTENÇAO 0 Capac. Total
Estoque_tq=2d0*Cap_total
Custo estoque ref= Estoque medio*Cotacao MP*(1d0+Juro)**(Tempo vida)
SE (Estoque_tq < Estoque_medio) ENTÃO
                              N_tq=DNINT((Estoque_medio-Estoque_tq)/Cap_Op)
FIM SE
Tancagem\_Refinaria = 1.3d2*5.16d5**(3d-1)*((4d0+N_tq)*Cap\_nominal)**(7d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(12d-1)*(
SE (n_pet==2) ENTÃO
                              Tancagem_Terminal=1.3d2*5.16d5**(3d-1)*(5d0*Cap_nominal)**(7d-1)
                              !CONTABILIZANDO 1 TQ RECEBENDO
                                                                                                                                                                                    1/2 Capac. Total
                                                              2 TQ REPOUSO (A e B) 2 Capac. Total
                                                                                                                                        1/2 Capac. Total
                                                              1 TQ ENVIANDO
                                                                                                                         1 TQ INJETANDO
                                                                                                                                                                                                    1/2 Capac. Total
                               Custo_estoque_term=Cotacao_MP*Cap_total*3.5d0*(1d0+Juro)**(Tempo_vida)
SENÃO
                              Tancagem_Terminal=1.3d2*5.16d5**(3d-1)*(7d0*Cap_nominal)**(7d-1)
                              !CONTABILIZANDO 1 TO RECEBENDO
                                                                                                                                                                                               1/2 Capac. Total
                                                              3 TQ REPOUSO (A e B e C) 3 Capac. Total
                                                                                                                                                  1/2 Capac. Total
                                                              1 TQ ENVIANDO
                                                                                                                         2 TO INJETANDO
                                                                                                                                                                                                               1/2 Capac. Total
                                                              1 TQ EM MANUTENÇÃO
                                                                                                                                                                     0 Capac. Total
                              Custo_estoque_term=Cotacao_MP*Cap_total*4.5d0*(1d0+Juro)**(Tempo_vida)
FIM SE
 !CALCULO DA DENSIDADE RELATIVA DE MISTURA
Dens_mist=Composicao_vol(1)*Propriedade(1,1)+Composicao_vol(2)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Composicao_vol(3)*Propriedade(1,2)+Compos
iedade(1,3)+&
                   Composicao_vol(4)*Propriedade(1,4)
 !Transformação de base volumétrica para base mássica
Composicao_m(1)=Composicao_vol(1)*Propriedade(1,1)/Dens_mist
Composicao_m(2)=Composicao_vol(2)*Propriedade(1,2)/Dens_mist
Composicao_m(3)=Composicao_vol(3)*Propriedade(1,3)/Dens_mist
```

Composicao\_m(s)=Composicao\_voi(s)\*Propriedade(1,5)/Dens\_mist

Composicao\_m(4)=Composicao\_vol(4)\*Propriedade(1,4)/Dens\_mist

#### !CALCULO DA VISCOSIDADE CINEMÁTICA DA MISTURA

CALL Calcula\_Viscosidade(Composicao\_m, Visc\_mist)

#### !CALCULO DA ACIDEZ TOTAL NO PETRÓLEO CRU

 $IAT\_cru=Composicao\_m(1)*Propriedade(6,1)+Composicao\_m(2)*Propriedade(6,2)+Composicao\_m(3)*Propriedade(6,3)+Composicao\_m(4)*Propriedade(6,4)$ 

#### !CÁLCULO DO RENDIMENTO MÁSSICO DO CORTE DE DIESEL PESADO

 $Rend\_DP = Composicao\_m(1)*Propriedade(20,1) + Composicao\_m(2)*Propriedade(20,2) + Composicao\_m(3)*Propriedade(20,3) + Composicao\_m(4)*Propriedade(20,4)$ 

#### !CÁLCULO DA ACIDEZ TOTAL DO CORTE DIESEL PESADO

 $IAT\_DP = (Composicao\_m(1)*Propriedade(20,1)*Propriedade(7,1) + Composicao\_m(2)*Propriedade(20,2)*Propriedade(20,2)*Propriedade(7,2) + Composicao\_m(3)*Propriedade(20,3)*Propriedade(7,3) + Composicao\_m(4)*Propriedade(20,4)*Propriedade(7,4)) / Rend\_DP$ 

#### !CÁLCULO DO RENDIMENTO VOLUMÉTRICO DO CORTE DE DISEL LEVE+PESADO

Rend\_DLP\_vol=Composicao\_vol(1)\*Propriedade(12,1)+Composicao\_vol(2)\*Propriedade(12,2)+Composicao\_vol(3)\*Propriedade(12,3)+Composicao\_vol(4)\*Propriedade(12,4)

#### !CÁLCULO DO RENDIMENTO MÁSSICO DO CORTE DE DISEL LEVE+PESADO

 $Rend\_DLP\_m=Composicao\_m(1)*Propriedade(19,1)+Composicao\_m(2)*Propriedade(19,2)+Composicao\_m(3)*Propriedade(19,3)+Composicao\_m(4)*Propriedade(19,4)$ 

!CÁLCULO DO TEOR DE ENXOFRE TOTAL DO CORTE DIESEL LEVE+PESADO

 $\label{lem:composition} Enxofre\_DLP=(Composicao\_m(1)*Propriedade(19,1)*Propriedade(8,1)+Composicao\_m(2)*Propriedade(19,2)*Propriedade(8,2)+Composicao\_m(3)*Propriedade(19,3)*Propriedade(8,3)+Composicao\_m(4)*Propriedade(19,4)*Propriedade(8,4)) / Rend\_DLP\_m$ 

#### !CÁLCULO DO RENDIMENTO VOLUMÉTRICO DO CORTE DE Gas combustivel

 $Rend\_GC\_vol=Composicao\_vol(1)*Propriedade(9,1)+Composicao\_vol(2)*Propriedade(9,2)+Composicao\_vol(3)*Propriedade(9,3)+Composicao\_vol(4)*Propriedade(9,4)$ 

#### !CÁLCULO DO RENDIMENTO VOLUMÉTRICO DO CORTE DE NAFTA

 $Rend\_NFT\_vol = Composicao\_vol(1)*Propriedade(10,1) + Composicao\_vol(2)*Propriedade(10,2) + Composicao\_vol(3)*Propriedade(10,3) + Composicao\_vol(4)*Propriedade(10,4)$ 

#### !CÁLCULO DO RENDIMENTO VOLUMÉTRICO DO CORTE DE OUEROSENE

 $Rend\_QRS\_vol=Composicao\_vol(1)*Propriedade(11,1)+Composicao\_vol(2)*Propriedade(11,2)+Composicao\_vol(3)*Propriedade(11,3)+Composicao\_vol(4)*Propriedade(11,4)$ 

#### CÁLCULO DO RENDIMENTO VOLUMÉTRICO DO CORTE DE GASOLEO DE VÁCUO!

 $Rend\_GO\_vol = Composicao\_vol(1)*Propriedade(14,1) + Composicao\_vol(2)*Propriedade(14,2) + Composicao\_vol(3)*Propriedade(14,3) + Composicao\_vol(4)*Propriedade(14,4)$ 

#### !CÁLCULO DO RENDIMENTO VOLUMÉTRICO DO CORTE DE RESÍDUO DE VÁCUO

 $Rend_RV_vol = Composicao_vol(1)*Propriedade(15,1) + Composicao_vol(2)*Propriedade(15,2) + Composicao_vol(3)*Propriedade(15,3) + Composicao_vol(4)*Propriedade(15,4)$ 

#### !CÁLCULO DO REVENUE DA MISTURA DE PETRÓLEOS

 $Revenue\_esp=(Rend\_GC\_vol*Revenue\_GLP+Rend\_NFT\_vol*Revenue\_NFT+Rend\_QRS\_vol*Revenue\_QRS+Rend\_DLP\_vol*Revenue\_DSL+Rend\_GO\_vol*Revenue\_VGO+Rend\_RV\_vol*Revenue\_RV)*1d-2$ 

 $Spread\_total = (Revenue\_esp-Cotacao\_MP)*Refino*Tempo\_vida*Dias\_ano*6d1*24d0/42d0 Rend\_RAT = Rend\_GO\_vol+Rend\_RV\_vol$ 

```
!AVALIAÇÃO DAS RESTRIÇÕES OPERACIONAIS
```

SE (Visc\_mist>Visc\_max) ENTÃO

ESCREVA Visc\_mist > Visc\_max

Lucro=-1d300

SENÃO

SE (Enxofre\_DLP>Enxofre\_max) ENTÃO

ESCREVAWRITE(Enxofre\_DLP > Enxofre\_max)

Lucro=-1d300

SENÃO

SE (IAT\_DP>IAT\_DP\_max) ENTÃO

WRITE(\*,8)IAT\_DP,IAT\_DP\_max

8 FORMAT('Acidez total no corte Diesel Pesado (%m) = ',F10.4,' > ',F10.4)

Lucro=-1d300

SENÃO

SE (IAT\_cru>IAT\_cru\_max) ENTÃO

WRITE(\*,10)IAT\_cru>IAT\_cru\_max

10 FORMAT('Acidez total no oleo (%m) = ',F10.4,' > ',F10.4)

Lucro=-1d300

SENÃO

SE (Rend\_NFT\_vol>Rend\_NFT\_max) ENTÃO

WRITE(\*,11)Rend\_NFT\_vol,Rend\_NFT\_max

11 FORMAT('Rendimento NAFTA (%vol) = ',F10.4,' > ',F10.4)

Lucro=-1d300

SENÃO

SE (Rend\_RAT>Rend\_RAT\_max) ENTÃO

WRITE(\*,12)Rend\_GO\_vol,Rend\_RV\_vol,Rend\_NFT\_max 12 FORMAT('Rendimento RAT (%vol) = ',F10.4,' +

',F10.4,' > ',F10.4)

Lucro=-1d300

SENÃO

Calcula Projetar\_bomba\_petroleo(Q, Dens\_mist, Visc\_mist, DI)

#### !Cálculo do custo

 $Despesas\_invest\_Invest\_Bombas\_min+Custo\_tubul+Mao\_de\_obra\_min+Miscelanea\_min+Right\_of\_way\_min+Custo\_duto\_suc+Despesa\_operacional+Tancagem\_Terminal+Tancagem\_Refinaria+Custo\_energia\_min\\ Volume\_duto=pi*DI*DI/4d0*L\_duto/144d0*7.48051948d0/42d0\\ Custo\_estoque\_duto=Cotacao\_MP*Volume\_duto*(1d0+Juro)**(Tempo\_vida)\\$ 

#### !CÁLCULO DO CUSTO DO ESTOQUE IMOBILIZADO

 $Custo\_estoque\_total = Custo\_estoque\_duto + Custo\_estoque\_term + Custo\_estoque\_ref$ 

!CÁLCULO DO CUSTO TOTAL Custo\_total=Despesas\_invest+Custo\_estoque\_total

 $Lucro = Spread\_total - Custo\_total$ 

FIM SE

FIM SE

FIM SE

FIM SE

LIMIS

FIM SE

FIM SE FIM SUBROTINA Calcula\_lucro

# APÊNDICE VII: RESULTADOS DA SIMULAÇÃO DO DESEMPENHO DO PROJETO DE DUTO Q = 240 mil bpd (7 mil gpm) PARA AS COMPOSIÇÕES FACTÍVEIS DA GRADE EXPERIMENTAL, INCERTEZAS APENAS NAS COTAÇÕES DE PETRÓLEO E DERIVADOS

									DLIN	1 / 71	705									
Petróleo A Pe	etróleo B P	Petróleo C Pe	etróleo D	Densidade relativa 60°F/60°F	Visc.cin. a [ 25°C [cSt] ]	AT cru IA mgKOH/g [m ]	T DP R ngKOH/g [9	end DLP [	Enxofre R DLP [%m] ['	tend GC %vol]	Rend NFT [%vol]	Rend QRS	S Rend GO [%vol]	Rend RV [%vol]	Rend RAT [%vol]	Vazão real [gpm]	Head real [ft]	Pressão desc [psi]	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	Potência Bomba #3 [MW]
0.00	0.60	0.08	0.32	0.8891	37.71	1.00	1.51	32.06	0.39	0.98	16.12	8.80	21.89	20.14	42.04	7,640.3	1,930.6	886.8	3 1.30	0.62
0.00	0.60	0.12	0.28	0.8954	48.20	1.11	1.69	31.54	0.41	0.96	15.00	8.40	) 22.71	21.40	44.10	7,524.3	1,959.9	899.4	1.3	1 0.62
0.00	0.70	0.04	0.26	0.8975	51.74	1.00	1.48	32.05	0.42	0.85	14.73	8.30	22.69	21.38	3 44.07	7,486.7	1,968.6	903.2	2 1.31	1 0.62
0.00	0.70	0.08	0.22	0.9038	67.10	1.10	1.65	31.54	0.44	0.82	13.60	7.90	23.50	22.63	3 46.14	7,385.2	2,003.4	918.1	1.33	3 0.61
0.00	0.80	0.04	0.16	0.9121	95.25	1.10	1.61	31.53	0.48	0.69	12.21	7.40	24.30	23.87	48.17	7,193.5	2,046.6	936.7	7 1.35	
0.00	0.50	0.15	0.35	0.8855	33.25	1.08	1.68	31.68	0.37	1.10	16.67	9.00	21.71	19.85	41.56	7,703.9	1,915.8	880.4	1.30	0.62
0.00	0.60	0.10	0.30	0.8923	42.58	1.05	1.60	31.80	0.40	0.97	15.56	8.60	) 22.30	20.77	43.07	7,579.4	1,944.6	892.8	3 1.30	0.62
0.00	0.60	0.05	0.35	0.8844	31.60	0.92	1.38	32.44	0.37	1.01	16.97	9.10			40.49	7,727.5	1,910.4	878.1	1.29	
0.00	0.70	0.05	0.25	0.8990	55.16	1.03	1.52	31.92	0.43	0.85	14.45	8.20	22.89	21.70	44.59	7,453.8	1,976.1	906.4	1.32	2 0.61
0.00	0.80	0.05	0.15	0.9137	102.24	1.13	1.65	31.40	0.48	0.69	11.93	7.30				7,122.8				
0.00	0.86	0.04	0.10	0.9210	141.69	1.16	1.69	31.22	0.51	0.60	10.70	6.86	5 25.26	5 25.37	50.63	6,941.4	2,093.6	956.9	1.39	9 0.60
0.00	0.81	0.04	0.15	0.9136	101.60	1.11	1.62	31.48	0.48	0.68	11.96		24.46	24.12	48.58	.,	,	938.4	1.36	
0.00	0.76	0.04	0.20	0.9063	74.06	1.06	1.56	31.74	0.46	0.76	13.22	7.76	23.65	22.88	46.53	7,334.2	2,015.9	923.5	5 1.34	
0.00	0.71	0.04	0.25	0.8989	54.85	1.01	1.49	32.00	0.43	0.84	14.48									
0.00	0.66	0.04	0.30	0.8916	41.23	0.96	1.42	32.26	0.40	0.92	15.74	8.66	5 22.04	20.39	42.43	7,594.8	1,941.1	891.3	3 1.30	0.62
0.00	0.61	0.04	0.35	0.8842	31.44	0.91	1.35	32.52	0.37	1.00	17.00	9.11			40.38			877.9	1.29	
0.00	0.72	0.08	0.20	0.9067	75.85	1.13	1.67	31.43	0.46	0.79	13.10	7.72	23.82	23.13	46.96	7,322.5	2,018.7	924.7	1.34	4 0.61
0.00	0.67	0.08	0.25	0.8994	56.10	1.07	1.61	31.69	0.43	0.87	14.36					7,445.5	,			
0.00	0.62	0.08	0.30	0.8920	42.12	1.02	1.54	31.95	0.40	0.95	15.62			20.64	42.86			892.3	1.30	0.62
0.00	0.57	0.08	0.35	0.8847	32.09	0.97	1.47	32.21	0.37	1.03	16.88					7,720.5				
0.00	0.58	0.12	0.30	0.8925	43.04	1.09	1.66	31.65	0.40	0.99	15.50	8.58	3 22.39	20.90	) 43.28	7,574.2	1,945.8	893.3	3 1.3	1 0.62
0.00	0.53	0.12	0.35	0.8851	32.75	1.03	1.59	31.91	0.37	1.07	16.76									
0.50	0.00	0.24	0.26	0.8901	35.91	1.01	1.69	28.63	0.39	1.33	15.98					.,	,, ,,			
0.60	0.00	0.16	0.24	0.8902	35.04	0.84	1.37	28.75	0.40	1.29	16.09					.,				
0.60	0.00	0.20	0.20	0.8965	44.60	0.95	1.57	28.24	0.42	1.26						.,	,			
0.70	0.00	0.08	0.22	0.8903	34.20	0.67	1.04	28.88	0.41	1.24	16.19					.,				
0.70	0.00	0.12	0.18	0.8966	43.47	0.78	1.24	28.36	0.43	1.22	15.07									
0.70	0.00	0.16	0.14	0.9029	55.86	0.88	1.44	27.85	0.46	1.19	13.94									
0.70	0.00	0.20	0.10	0.9093	72.62	0.99	1.63	27.34	0.48	1.16						. ,				
0.80	0.00	0.04	0.16	0.8967	42.37	0.61	0.91	28.49	0.45	1.17	15.17					.,	,			
0.80	0.00	0.08	0.12	0.9030	54.38	0.72	1.11	27.98	0.47	1.14	14.04					.,				
0.80	0.00	0.12	0.08	0.9094	70.59	0.82	1.31	27.46	0.49	1.12	12.92									
0.80	0.00	0.16	0.04	0.9157	92.74	0.93	1.50	26.95	0.52	1.09	11.79					7,183.9	,	,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,		
0.90	0.00	0.04	0.06	0.9095	68.62	0.66	0.98	27.59	0.50	1.07	13.02						2,014.1			
0.90	0.00	0.08	0.02	0.9158	90.02	0.76	1.18	27.08	0.53	1.04	11.89					.,				
0.60	0.00	0.20	0.20	0.8965	44.60	0.95	1.57	28.24	0.42	1.26	14.96					- ,				
0.60	0.00	0.15	0.25	0.8886	33.05	0.81	1.32	28.88	0.39	1.30	16.37					.,	,- ,-			
0.70	0.00	0.20	0.10	0.9093	72.62	0.99	1.63	27.34	0.48	1.16	12.81					. ,	,			
0.70	0.00	0.15	0.15	0.9014	52.41	0.86	1.39	27.98	0.45	1.20	14.22	8.60	23.74	1 24.27	7 48.01	7,460.6	1,975.8	906.3	3 1.3	1 0.62

0.80	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	ssão : c [psi] :		Head real [ft]	Vazão real [gpm]	Rend RAT [%vol]	Rend RV [%vol]			Rend NFT [%vol]		Enxofre DLP [%m]	Rend DLP [%vol]	IAT DP [mgKOH/g ]	IAT cru I [mgKOH/g [ ]	Visc.cin. a 25°C [cSt]	Densidade relativa 60°F/60°F	Petróleo D	Petróleo C	Petróleo B	Petróleo A 1
No.   No.	1.30	890.5	<i>l</i> .1	1,939.	7,609.7	45.42	22.70	22.72	9.10	15.63	1.23	0.42	28.62	1.14	0.73	38.50	0.8934	0.20	0.10	0.00	0.70
0.80		934.2		,	.,				7.90			0.51				86.52					
0.90	1.32	916.8	1.2	2,000.	7,401.0	49.27	25.11	24.16	8.40	13.48	1.13	0.48	27.72	1.21	0.77	61.86	0.9062	0.10	0.10	0.00	0.80
0.91   0.00   0.04   0.05   0.9107   72.18   0.66   0.99   27.50   0.51   1.06   12.81   8.23   24.52   25.88   50.40   7.318.3   2.020.5   925.		898.8			. ,																
0.86		926.3		,	. ,																
0.81   0.00   0.04   0.15   0.8980   44.38   0.02   0.92   28.40   0.45   1.16   14.96   8.93   23.08   23.47   46.55   7.533.3   1.956.9   898.		925.5		,																	
0.76		910.8			.,																
0.87	1.31			,	. ,																
0.82   0.00   0.08   0.10   0.9056   59.44   0.73   1.12   27.80   0.48   1.12   13.61   8.46   24.04   24.97   49.01   7.415.8   1.966.5   915.		886.6		,																	
0.77   0.00   0.08   0.15   0.8992   47.12   0.70   1.09   28.25   0.45   1.17   14.69   8.81   23.32   23.76   47.08   7,504.3   1,963.3   900.					.,																
0.72		-																			
0.67				,	.,																
0.83   0.00   0.12   0.05   0.9132   82.30   0.84   1.33   27.19   0.51   1.09   12.27   7.99   25.00   26.46   51.46   7.254.0   2.035.9   932.	1.30			,	.,															0.00	
0.78																					
0.73   0.00   0.12   0.15   0.9004   50.06   0.79   1.26   28.09   0.45   1.19   14.42   8.69   23.56   24.05   47.61   7.482.8   1.970.7   904.	1.34 (			,																	
0.68         0.00         0.12         0.20         0.8941         39.64         0.77         1.23         28.54         0.42         1.24         15.50         9.04         22.84         22.84         45.68         7,595.9         1,942.2         891.1           0.63         0.00         0.12         0.25         0.8877         31.69         0.75         1.19         28.99         0.39         1.29         16.57         9.39         22.12         21.64         43.76         7,709.0         1.916.0         880.           0.79         0.00         0.16         0.05         0.9144         87.99         0.92         1.50         27.04         0.51         1.10         12.00         7.87         25.24         26.75         51.99         7,212.1         2,042.7         935.           0.74         0.00         0.16         0.10         0.990.06         68.07         0.90         1.46         27.49         0.48         1.15         13.08         8.22         24.52         25.54         50.06         7,355.6         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2         20.11.2				,	.,																
0.63         0.00         0.12         0.25         0.8877         31.69         0.75         1.19         28.99         0.39         1.29         16.57         9.39         22.12         21.64         43.76         7,79.0         1,916.0         880.           0.79         0.00         0.16         0.05         0.9144         87.99         0.92         1.50         27.04         0.51         1.10         12.00         7.87         25.24         26.75         51.99         7,212.1         2,042.7         935.           0.74         0.00         0.16         0.15         0.908         68.07         0.90         1.46         27.49         0.48         1.15         13.08         8.22         24.52         25.54         50.06         7,355.6         2,011.2         921.           0.69         0.00         0.16         0.15         0.9017         53.22         0.88         1.43         27.94         0.45         1.20         14.15         8.57         23.80         24.34         48.14         7,453.1         1,977.4         907.           0.64         0.00         0.16         0.25         0.8889         33.52         0.84         1.36         28.84         0.40         <	1.31				.,																
0.79         0.00         0.16         0.05         0.9144         87.99         0.92         1.50         27.04         0.51         1.10         12.00         7.87         25.24         26.75         51.99         7,212.1         2,042.7         935.           0.74         0.00         0.16         0.10         0.9080         68.07         0.90         1.46         27.49         0.48         1.15         13.08         8.22         24.52         25.54         50.06         7,355.6         2,011.2         921.           0.69         0.00         0.16         0.15         0.9017         53.22         0.88         1.43         27.94         0.45         1.20         14.15         8.57         23.80         24.34         48.14         7,453.1         1,977.4         907.9           0.64         0.00         0.16         0.20         0.8953         42.03         0.42         1.25         15.23         8.92         23.08         24.34         48.14         7,453.1         1,977.4         907.9           0.59         0.00         0.16         0.25         0.8889         33.52         0.84         1.36         28.84         0.40         1.30         16.30         9.27	1.30		_	,-	.,																
0.74         0.00         0.16         0.10         0.9080         68.07         0.90         1.46         27.49         0.48         1.15         13.08         8.22         24.52         25.54         50.06         7,355.6         2,011.2         921.           0.69         0.00         0.16         0.15         0.9017         53.22         0.88         1.43         27.94         0.45         1.20         14.15         8.57         23.80         24.34         48.14         7,453.1         1,977.4         907.           0.64         0.00         0.16         0.20         0.8953         42.03         0.86         1.40         28.39         0.42         1.25         15.23         8.92         23.08         23.13         46.21         7,568.0         1,948.5         894.           0.59         0.00         0.16         0.25         0.8889         33.52         0.84         1.36         28.84         0.40         1.30         16.30         9.27         22.36         21.93         44.29         7,683.1         1,921.9         883.           0.75         0.00         0.20         0.05         0.9156         94.14         1.01         1.66         26.89         0.51	1.29 (				.,																
0.69         0.00         0.16         0.15         0.9017         53.22         0.88         1.43         27.94         0.45         1.20         14.15         8.57         23.80         24.34         48.14         7,453.1         1,977.4         907.4           0.64         0.00         0.16         0.20         0.8953         42.03         0.86         1.40         28.39         0.42         1.25         15.23         8.92         23.08         23.13         46.21         7,568.0         1,948.5         894.           0.59         0.00         0.16         0.25         0.8889         33.52         0.84         1.36         28.84         0.40         1.30         16.30         9.27         22.36         21.93         44.29         7,683.1         1,921.9         883.           0.75         0.00         0.20         0.05         0.9156         94.14         1.01         1.66         26.89         0.51         1.11         11.74         7.75         25.48         27.04         52.52         7,178.2         2,050.8         938.           0.70         0.00         0.20         0.15         0.9093         72.62         0.99         1.60         27.79         0.45				,	.,																
0.64         0.00         0.16         0.20         0.8953         42.03         0.86         1.40         28.39         0.42         1.25         15.23         8.92         23.08         23.13         46.21         7,568.0         1,948.5         894.           0.59         0.00         0.16         0.25         0.8889         33.52         0.84         1.36         28.84         0.40         1.30         16.30         9.27         22.36         21.93         44.29         7,683.1         1,921.9         883.           0.75         0.00         0.20         0.05         0.9156         94.14         1.01         1.66         26.89         0.51         1.11         11.74         7.75         25.48         27.04         52.52         7,178.2         2,050.8         938.           0.70         0.00         0.20         0.10         0.9093         72.62         0.99         1.63         27.34         0.48         1.16         12.81         8.10         24.76         25.83         50.59         7,324.5         2,018.8         924.           0.65         0.00         0.20         0.15         0.9093         75.62         0.97         1.60         27.79         0.45		-																0110		0.00	
0.59         0.00         0.16         0.25         0.8889         33.52         0.84         1.36         28.84         0.40         1.30         16.30         9.27         22.36         21.93         44.29         7,683.1         1,921.9         883.           0.75         0.00         0.20         0.05         0.9156         94.14         1.01         1.66         26.89         0.51         1.11         11.74         7.75         25.48         27.04         52.52         7,178.2         2,050.8         938.           0.70         0.00         0.20         0.10         0.9093         72.62         0.99         1.63         27.34         0.48         1.16         12.81         8.10         24.76         25.83         50.59         7,324.5         2,018.8         924.           0.65         0.00         0.20         0.15         0.9029         56.62         0.97         1.60         27.79         0.45         1.21         13.89         8.45         24.04         24.63         48.67         7,451.5         1,987.5         911.           0.60         0.00         0.20         0.25         0.8901         35.47         0.92         1.53         28.69         0.40					.,																
0.75         0.00         0.20         0.05         0.9156         94.14         1.01         1.66         26.89         0.51         1.11         11.74         7.75         25.48         27.04         52.52         7,178.2         2,050.8         938.           0.70         0.00         0.20         0.10         0.9993         72.62         0.99         1.63         27.34         0.48         1.16         12.81         8.10         24.76         25.83         50.59         7,324.5         2,018.8         924.           0.65         0.00         0.20         0.15         0.9029         56.62         0.97         1.60         27.79         0.45         1.21         13.89         8.45         24.04         24.63         48.67         7,451.5         1,987.5         911.           0.60         0.00         0.20         0.25         0.8965         44.60         0.95         1.57         28.24         0.42         1.26         14.96         8.80         23.32         23.42         46.74         7,539.5         1,954.9         897.           0.55         0.00         0.20         0.25         0.8901         35.47         0.92         1.53         28.69         0.40	1.30 (																				
0.70         0.00         0.20         0.10         0.9993         72.62         0.99         1.63         27.34         0.48         1.16         12.81         8.10         24.76         25.83         50.59         7,324.5         2,018.8         924.           0.65         0.00         0.20         0.15         0.9029         56.62         0.97         1.60         27.79         0.45         1.21         13.89         8.45         24.04         24.63         48.67         7,451.5         1,987.5         911.           0.60         0.00         0.20         0.20         0.8965         44.60         0.95         1.57         28.24         0.42         1.26         14.96         8.80         23.32         23.42         46.74         7,539.5         1,954.9         897.           0.55         0.00         0.20         0.25         0.8901         35.47         0.92         1.53         28.69         0.40         1.31         16.04         9.15         22.60         22.22         44.82         7,656.6         1,927.9         885.7           0.46         0.00         0.24         0.30         0.8850         30.09         0.99         1.67         28.99         0.37				,-	.,															0.00	
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$				,	.,															0.00	
0.60         0.00         0.20         0.8965         44.60         0.95         1.57         28.24         0.42         1.26         14.96         8.80         23.32         23.42         46.74         7,539.5         1,954.9         897.           0.55         0.00         0.20         0.25         0.8901         35.47         0.92         1.53         28.69         0.40         1.31         16.04         9.15         22.60         22.22         44.82         7,656.6         1,927.9         885.           0.46         0.00         0.24         0.30         0.8850         30.09         0.99         1.67         28.99         0.37         1.37         16.84         9.38         22.12         21.30         43.42         7,741.1         1,908.0         877.           0.10         0.60         0.00         0.30         0.8892         36.79         0.83         1.22         32.18         0.40         0.94         16.23         8.90         21.70         20.05         41.75         7,648.6         1,929.0         886.           0.10         0.70         0.00         0.20         0.9039         65.25         0.94         1.36         31.66         0.45         0.78																					
0.55         0.00         0.20         0.25         0.8901         35.47         0.92         1.53         28.69         0.40         1.31         16.04         9.15         22.60         22.22         44.82         7,656.6         1,927.9         885.           0.46         0.00         0.24         0.30         0.8850         30.09         0.99         1.67         28.99         0.37         1.37         16.84         9.38         22.12         21.30         43.42         7,741.1         1,908.0         877.           0.10         0.60         0.00         0.30         0.8892         36.79         0.83         1.22         32.18         0.40         0.94         16.23         8.90         21.70         20.05         41.75         7,648.6         1,929.0         886.           0.10         0.70         0.00         0.20         0.9039         65.25         0.94         1.36         31.66         0.45         0.78         13.71         8.00         23.31         22.54         45.85         7,394.9         2,001.2         917.           0.10         0.80         0.00         0.10         0.9186         123.08         1.04         1.50         31.14         0.51				,	-,							0						0110		0.00	
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$					. ,																
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	1.29				.,																
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	1.30																			0.00	
0.10         0.80         0.00         0.10         0.9186         123.08         1.04         1.50         31.14         0.51         0.62         11.19         7.10         24.92         25.03         49.95         7,018.9         2,076.5         949.0           0.20         0.50         0.00         0.30         0.8873         33.59         0.77         1.13         31.80         0.39         1.00         16.60         9.10         21.53         19.97         41.50         7,690.9         1,919.4         882.0           0.20         0.60         0.00         0.20         0.9020         58.97         0.88         1.28         31.28         0.45         0.84         14.08         8.20         23.14         22.46         45.60         7,442.4         1,989.5         912.           0.20         0.70         0.00         0.10         0.9167         109.99         0.98         1.42         30.76         0.51         0.68         11.56         7.30         24.75         24.95         49.70         7,077.2         2,062.8         943.1	1.33																				
0.20     0.50     0.00     0.30     0.8873     33.59     0.77     1.13     31.80     0.39     1.00     16.60     9.10     21.53     19.97     41.50     7,690.9     1,919.4     882.4       0.20     0.60     0.00     0.20     0.9020     58.97     0.88     1.28     31.28     0.45     0.84     14.08     8.20     23.14     22.46     45.60     7,442.4     1,989.5     912.3       0.20     0.70     0.00     0.10     0.9167     109.99     0.98     1.42     30.76     0.51     0.68     11.56     7.30     24.75     24.95     49.70     7,077.2     2,062.8     943.3		949.6																			
0.20         0.60         0.00         0.20         0.9020         58.97         0.88         1.28         31.28         0.45         0.84         14.08         8.20         23.14         22.46         45.60         7,442.4         1,989.5         912.1           0.20         0.70         0.00         0.10         0.9167         109.99         0.98         1.42         30.76         0.51         0.68         11.56         7.30         24.75         24.95         49.70         7,077.2         2,062.8         943.1		882.0										0.0-2						0.10	0.00	0.00	
0.20 0.70 0.00 0.10 0.9167 109.99 0.98 1.42 30.76 0.51 0.68 11.56 7.30 24.75 24.95 49.70 7,077.2 2,062.8 943.		912.2		,- ,-	.,																
		943.7																			
0.30 0.40 0.00 0.30 0.8853 30.72 0.71 1.04 31.42 0.39 1.06 16.97 9.30 21.36 19.89 41.25 7.732.0 1.910.0 878.0		878.0		,	.,																
		906.0			.,																
	1.36	939.7																			
		901.4		,	.,					14.82		0.44			0.75		0.8981	0.20	0.00	0.40	0.40

Petróleo A	Petróleo B	Petróleo C	Petróleo D	Densidade relativa 60°F/60°F	Visc.cin. a 25°C [cSt]	IAT cru [mgKOH/g ]	IAT DP [mgKOH/g ]	Rend DLP	Enxofre DLP [%m]	Rend GC [%vol]	Rend NFT [%vol]	Rend QR:	S Rend GO [%vol]	Rend RV [%vol]	Rend RAT [%vol]	Vazão real [gpm]	Head real [ft]	Pressão desc [psi]	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	Potência Bomba #3 [MW]
0.40	0.50	0.00	0.10	0.9128	88.39	0.86	1.25	30.00	0.50	0.80	) 12.30	) 7.7	0 24.4	1 24.79	49.20	7,219.6	5 2,040.7	7 934.2	2 1.3	5 0.61
0.50	0.30	0.00	0.20	0.8962	44.02	0.69	1.01	30.14	4 0.44	1.02	2 15.19	8.8	0 22.6	3 22.22	2 44.85	7,546.1	1,953.4	1 896.6	5 1.3	
0.50	0.40	0.00	0.10	0.9109	79.47	0.80	1.17	29.62	2 0.50	0.86	5 12.67	7.9	0 24.2	4 24.71	48.95	7,281.0	2,029.2	929.3	3 1.3	
0.60	0.20	0.00				0.63	0.92													
0.60	0.30	0.00					1.08									. ,				
0.70	0.10	0.00				0.57	0.81	29.38		1.14						.,	,			
0.70	0.20	0.00					0.98			0.98						.,				
0.80	0.10	0.00			58.44	0.61	0.88			1.04							,			
0.10	0.80	0.00				1.04	1.50			0.62										
0.10	0.75	0.00					1.43			0.70						.,	,			
0.10	0.70	0.00				0.94	1.36			0.78										
0.10	0.65	0.00				0.89	1.29			0.86							<i>j.</i>			
0.10	0.60	0.00				0.83	1.22			0.94						.,	,, , , , , ,			
0.20	0.70	0.00				0.98	1.42			0.68						.,	2,062.8			
0.20	0.65	0.00				0.93	1.35			0.76						-,	,			
0.20	0.60	0.00				0.88	1.28			0.84							,,			
0.20	0.55	0.00				0.82	1.21	31.54		0.92							1,951.1			
0.20	0.50	0.00				0.77	1.13			1.00							,,			
0.30	0.60	0.00	0	0.,		0.92	1.34			0.74						-,	2,053.6			
0.30	0.55						1.27			0.82						,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,	, , , , , ,			
0.30	0.50	0.00					1.19			0.90						.,	,			
0.30	0.45	0.00					1.12									.,				
0.30	0.40	0.00				0.71	1.04			0.72										
0.40	0.50	0.00				0.91										.,	, , , , , ,			
0.40	0.30	0.00					1.25			0.80										
0.40	0.40	0.00					1.10			0.96						.,				
0.40	0.40	0.00				0.70	1.03			1.04						. ,	,, , , , ,			
0.40	0.35	0.00					1.03			0.78										
0.50	0.40	0.00	0.00			0.80	1.17			0.76						.,	,			
0.50	0.35	0.00		01,7 = 0,7			1.09			0.94										
0.50	0.30	0.00					1.01			1.02							1,953.4			
0.50	0.25	0.00					0.93			1.10										
0.60	0.35	0.00				0.79	1.15			0.84										
0.60	0.30	0.00				0.74	1.08			0.92						-,	,			
0.60	0.25	0.00	0.20			0.68	1.00			1.00						- ,	,			
0.60	0.20	0.00				0.63	0.92			1.08						-,				
0.60	0.15	0.00				0.57	0.83			1.16						- ,,				
0.70	0.25	0.00					1.06													
0.70	0.20	0.00					0.98			0.98										

Petróleo A Pe	tróleo B Pe	etróleo C Pe	D etróleo D re 6	Densidade velativa 2	Visc.cin. a IA 5°C [cSt]	T cru IA ngKOH/g [m	T DP gKOH/g [%	end DLP E 6vol] D	nxofre Re LP [% m] [%	end GC R	end NFT R %vol] [9	end QRS Ro %vol] [%	end GO R %vol] [%	end RV 6vol]	Rend RAT [%vol]	Vazão real [gpm]	Head real [ft]	Pressão desc [psi]	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	Potência Bomba #3 [MW]
0.70	0.15	0.00	0.15	0.8997	48.24	0.62	0.90	29.12	0.46	1.06	14.67	8.75	23.10	23.31	46.40	7,500.9	1,966.7	902.4	1.31	1 0.62
0.70	0.10	0.00	0.20	0.8923	36.54	0.57	0.81	29.38	0.43	1.14	15.93	9.20	22.29	22.06	44.35	7,634.4	1,933.6	888.1	1.30	0.62
0.80	0.15	0.00	0.05	0.9124	79.05	0.67	0.97	28.22	0.52	0.96	12.52	8.05	24.54	25.72	50.25	7,274.1	2,031.1	930.1	1.34	4 0.61
0.80	0.10	0.00	0.10	0.9051	58.44	0.61	0.88	28.48	0.48	1.04	13.78	8.50	23.73	24.47	48.20	7,427.8	1,993.6	913.9	1.32	2 0.61
0.80	0.05	0.00	0.15	0.8977	43.85	0.56	0.80	28.74	0.45	1.12	15.04	8.95	22.93	23.23	46.15	7,539.2	1,955.6	897.6	1.30	0.62
0.90	0.05	0.00	0.05	0.9105	71.23	0.61	0.87	27.84	0.51	1.02	12.89	8.25	24.37	25.64	50.00	7,324.7	2,018.9	924.9	1.33	3 0.61
0.85	0.10	0.00	0.05	0.9115	75.02	0.64	0.92	28.03	0.51	0.99	12.71	8.15	24.45	25.68	50.13	7,299.7	2,025.0	927.4	1.34	
0.80	0.10	0.00	0.10	0.9051	58.44	0.61	0.88	28.48	0.48	1.04	13.78	8.50	23.73	24.47	48.20	7,427.8	1,993.6		1.32	
0.75	0.10	0.00	0.15	0.8987	45.98	0.59	0.85	28.93	0.45	1.09	14.86	8.85	23.01	23.27	46.28	7,516.3	1,960.6		1.31	
0.70	0.10	0.00	0.20	0.8923	36.54	0.57	0.81	29.38	0.43	1.14	15.93	9.20	22.29	22.06	44.35	7,634.4	1,933.6		1.30	
0.75	0.20	0.00	0.05	0.9134	83.33	0.70	1.01	28.41	0.52	0.93	12.34	7.95	24.62	25.76	50.38	7,239.1	2,036.2	932.3	1.34	
0.70	0.20	0.00	0.10	0.9070	64.62	0.68	0.98	28.86	0.49	0.98	13.41	8.30	23.90	24.55	48.45	7,380.6	2,005.1	918.9	1.33	
0.65	0.20	0.00	0.15	0.9006	50.63	0.65	0.95	29.31	0.46	1.03	14.49	8.65	23.18	23.35	46.53	7,472.6	1,973.4	904.4	1.31	
0.60	0.20	0.00	0.20	0.8942	40.07	0.63	0.92	29.76	0.43	1.08	15.56	9.00	22.46	22.14	44.60	7,591.0	1,943.3	892.3	1.30	
0.55	0.20	0.00	0.25	0.8879	32.02	0.60	0.88	30.21	0.40	1.13	16.64	9.35	21.74	20.94	42.68	7,704.5	1,917.0	881.0	1.29	
0.65	0.30	0.00	0.05	0.9153	92.74	0.76	1.11	28.79	0.52	0.87	11.97	7.75	24.79	25.84	50.63	7,186.1	2,048.9	937.7	1.35	
0.60	0.30	0.00	0.10	0.9089	71.59	0.74	1.08	29.24	0.49	0.92	13.04	8.10	24.07	24.63	48.70	7,331.7	2,017.0	924.0	1.33	
0.55	0.30	0.00	0.15	0.9026	55.85	0.71	1.04	29.69	0.46	0.97	14.12	8.45	23.35	23.43	46.78	7,429.8	1,982.7	909.2	1.32	
0.50	0.30	0.00	0.20	0.8962	44.02	0.69	1.01	30.14	0.44	1.02	15.19	8.80	22.63	22.22	44.85	7,546.1	1,953.4	896.6	1.31	
0.45	0.30	0.00	0.25	0.8898	35.03 103.43	0.87	0.98 1.20	30.59 29.17	0.41	0.81	16.27 11.60	9.15 7.55	21.91 24.96	21.02 25.92	42.93 50.88	7,662.8	1,926.5 2,057.8	885.0 941.6	1.30	
0.50	0.40	0.00	0.03	0.9172	79.47	0.82	1.17	29.17	0.50	0.86	12.67	7.90	24.96	24.71	48.95	7,098.4	2,037.8	929.3	1.34	
0.30	0.40	0.00	0.10	0.9109	61.72	0.78	1.17	30.07	0.30	0.80	13.75	8.25	23.52	23.51	48.93	7,281.0	1,997.3	915.5	1.32	
0.40	0.40	0.00	0.13	0.8981	48.44	0.75	1.14	30.52	0.44	0.91	14.82	8.60	22.80	22.30	45.10	7,411.0	1,964.5	901.4	1.32	
0.40	0.40	0.00	0.25	0.8917	38.39	0.73	1.07	30.97	0.41	1.01	15.90	8.95	22.08	21.10	43.18	7,507.9	1,936.2	889.2	1.30	
0.30	0.40	0.00	0.23	0.8853	30.72	0.73	1.04	31.42	0.39	1.06	16.97	9.30	21.36	19.89	41.25	7,732.0	1,930.2	878.0	1.29	
0.45	0.50	0.00	0.05	0.9192	115.58	0.88	1.29	29.55	0.53	0.75	11.23	7.35	25.13	26.00	51.13	7,732.0	2,071.4	947.4	1.37	
0.40	0.50	0.00	0.10	0.9128	88.39	0.86	1.25	30.00	0.50	0.80	12.30	7.70	24.41	24.79	49.20	7,219.6	2,040.7	934.2	1.35	
0.35	0.50	0.00	0.15	0.9064	68.34	0.84	1.22	30.45	0.47	0.85	13.38	8.05	23.69	23.59	47.28	7,363.5	2,009.1	920.6	1.33	
0.30	0.50	0.00	0.20	0.9000	53.40	0.82	1.19	30.90	0.44	0.90	14.45	8.40	22.97	22.38	45.35	7,460.8	1,975.1	906.0	1.31	
0.25	0.50	0.00	0.25	0.8937	42.15	0.79	1.16	31.35	0.42	0.95	15.53	8.75	22.25	21.18	43.43	7,575.7	1,946.1	893.5	1.30	
0.20	0.50	0.00	0.30	0.8873	33.59	0.77	1.13	31.80	0.39	1.00	16.60	9.10	21.53	19.97	41.50	7,690.9	1,919.4	882.0	1.30	0.62
0.30	0.60	0.00	0.10	0.9147	98.50	0.92	1.34	30.38	0.50	0.74	11.93	7.50	24.58	24.87	49.45	7,165.1	2,053.6	939.7	1.36	5 0.61
0.25	0.60	0.00	0.15	0.9083	75.81	0.90	1.31	30.83	0.48	0.79	13.01	7.85	23.86	23.67	47.53	7,313.5	2,021.1	925.8	1.34	1 0.61
0.20	0.60	0.00	0.20	0.9020	58.97	0.88	1.28	31.28	0.45	0.84	14.08	8.20	23.14	22.46	45.60	7,442.4	1,989.5	912.2	1.32	2 0.61
0.15	0.60	0.00	0.25	0.8956	46.35	0.85	1.25	31.73	0.42	0.89	15.16	8.55	22.42	21.26	43.68	7,530.1	1,956.3	897.9	1.31	0.62
0.10	0.60	0.00	0.30	0.8892	36.79	0.83	1.22	32.18	0.40	0.94	16.23	8.90	21.70	20.05	41.75	7,648.6	1,929.0	886.1	1.30	0.62
0.20	0.70	0.00	0.10	0.9167	109.99	0.98	1.42	30.76	0.51	0.68	11.56	7.30	24.75	24.95	49.70	7,077.2	2,062.8	943.7	1.36	6 0.61
0.15	0.70	0.00	0.15	0.9103	84.25	0.96	1.39	31.21	0.48	0.73	12.64	7.65	24.03	23.75	47.78	7,252.6	2,032.4	930.6	1.34	4 0.61
0.10	0.70	0.00	0.20	0.9039	65.25	0.94	1.36	31.66	0.45	0.78	13.71	8.00	23.31	22.54	45.85	7,394.9	2,001.2	917.2	1.33	3 0.61
0.05	0.70	0.00	0.25	0.8975	51.06	0.92	1.33	32.11	0.43	0.83	14.79	8.35	22.59	21.34	43.93	7,491.4	1,967.6	902.8	1.31	1 0.62
0.10	0.80	0.00	0.10	0.9186	123.08	1.04	1.50	31.14	0.51	0.62	11.19	7.10	24.92	25.03	49.95	7,018.9	2,076.5	949.6	1.38	
0.05	0.80	0.00	0.15	0.9122	93.83	1.02	1.47	31.59	0.48	0.67	12.27	7.45	24.20	23.83	48.03	7,199.2	2,045.3	936.1	1.35	5 0.61

## APÊNDICE VIII: RESULTADOS DA SIMULAÇÃO DO DESEMPENHO DO PROJETO DE DUTO Q = 240 mil bpd (7 mil gpm) PARA AS COMPOSIÇÕES FACTÍVEIS DA GRADE EXPERIMENTAL, INCERTEZAS NAS COTAÇÕES DE PETRÓLEO E DERIVADOS E NOS DOIS PARÂMETROS DA EQUAÇÃO DE CORREÇÃO DE VISCOSIDADE

Petróleo A F									DLP [%m]	[%vol]	[% vol]	[%vol]	[% vol]	Rend RV [%vol]	[%vol]	[gpm]	[ft]	Pressão desc [psi]	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	Potência Bomba #3 [MW]
0.00	0.60	0.08	0.32	0.8891	37.71	1.00	1.51	32.00	6 0.39	0.98	16.12	8.80	21.8	9 20.14	42.04	6,782.5	1,845	3 850.3	3 2.67	7 0.60
0.00	0.60	0.12	0.28	0.8954	48.20	1.11	1.69			0.96										
0.00	0.70	0.04	0.26	0.8975	51.74	1.00	1.48										,			
0.00	0.70	0.08	0.22	0.9038	67.10	1.10	1.65									- ,	,			
0.00	0.80	0.04	0.16	0.9121	95.25	1.10	1.61	31.53												
0.00	0.50	0.15	0.35	0.8855	33.25	1.08	1.68			1.10										
0.00	0.60	0.10	0.30	0.8923	42.58	1.05	1.60													
0.00	0.60	0.05	0.35	0.8844	31.60	0.92	1.38													
0.00	0.70	0.05	0.25	0.8990	55.16	1.03	1.52													
0.00	0.80	0.05	0.15	0.9137	102.24	1.13	1.65										1,814.8			
0.00	0.86	0.04	0.10	0.9210	141.69	1.16	1.69			0.60										
0.00	0.81	0.04	0.15	0.9136	101.60	1.11	1.62										,			
0.00	0.76	0.04	0.20	0.9063	74.06	1.06	1.56									- ,	,			
0.00	0.71	0.04	0.25	0.8989	54.85	1.01	1.49					8.2				-, -				
0.00	0.66	0.04	0.30	0.8916	41.23	0.96	1.42										,			
0.00	0.61	0.04	0.35	0.8842	31.44	0.91	1.35	32.52	2 0.37	1.00	17.00	9.11	21.2	4 19.14	40.38	7,000.8	1,839.5	5 847.8	3 2.36	6 0.60
0.00	0.72	0.08	0.20	0.9067	75.85	1.13	1.67	31.43				7.72				5,690.4	1,837.9			
0.00	0.67	0.08	0.25	0.8994	56.10	1.07	1.61	31.69	0.43	0.87	14.36	8.17	23.0	2 21.89	44.91	6,217.6	1,848.0	851.6	3.97	0.59
0.00	0.62	0.08	0.30	0.8920	42.12	1.02	1.54							1 20.64		-,	,			
0.00	0.57	0.08	0.35	0.8847	32.09	0.97	1.47			1.03							,			
0.00	0.58	0.12	0.30	0.8925	43.04	1.09	1.66										,			
0.00	0.53	0.12	0.35	0.8851	32.75	1.03	1.59					9.03	3 21.5	8 19.65	41.23	6,955.1	1,840.	7 848.3		
0.50	0.00	0.24	0.26	0.8901	35.91	1.01	1.69													
0.60	0.00	0.16	0.24	0.8902	35.04	0.84	1.37													
0.60	0.00	0.20	0.20	0.8965	44.60	0.95	1.57									-,-	,			
0.70	0.00	0.08	0.22	0.8903	34.20	0.67	1.04			1.24						-,,	,			
0.70	0.00	0.12	0.18	0.8966	43.47	0.78	1.24													
0.70	0.00	0.16	0.14	0.9029	55.86	0.88	1.44			1.19	13.94	8.50	) 23.9	4 24.58	3 48.52	6,199.5	1,853.	1 853.8	3.95	
0.70	0.00	0.20	0.10	0.9093	72.62	0.99	1.63													
0.80	0.00	0.04	0.16	0.8967	42.37	0.61	0.91					9.00			3 46.17	6,601.4				
0.80	0.00	0.08	0.12	0.9030	54.38	0.72	1.11	27.98								-,				
0.80	0.00	0.12	0.08	0.9094	70.59	0.82	1.31	27.46	0.49	1.12	12.92	8.20	24.5	7 25.74	50.30	5,793.4	1,847.	851.4	5.96	5 0.58

Petróleo A	Petróleo B	Petróleo C	Petróleo D	Densidad e relativa 60°F/60° F	Visc.cin. a 25°C [cSt]	IAT cru [mgKOH/ g]	IAT DP [mgKOH/ g]	Rend DLP [%vol]	Enxofre DLP [%m]	Rend GC [%vol]	Rend NFT [%vol]	Rend QRS [%vol]	Rend GO [%vol]	Rend RV [%vol]	Rend RAT [%vol]	Vazão real [gpm]	Head real	Pressão desc [psi]	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	Potência Bomba #3 [MW]
0.80	0.00	0.16	0.04	0.9157	92.74	0.93	1.50	26.95	0.52	2 1.09	11.79	7.80	25.38	3 26.99	52.37	5,245.0	1,829.0	843.7	18.63	0.56
0.90	0.00	0.04	0.06	0.9095	68.62	0.66	0.98	27.59	0.50	1.07	13.02	2 8.30	24.3	3 25.64	50.02	5,839.2	2 1,849.4	852.3	5.59	0.58
0.90	0.00	0.08	0.02	0.9158	90.02	0.76	1.18	27.08	0.53	3 1.04	11.89	7.90	25.19	9 26.89	52.09	5,303.5	1,832.5	845.2	14.93	0.57
0.60					44.60		1.57	28.24								- ,	,			
0.60	0.00	0.15		0.8886	33.05	0.81	1.32			9 1.30	16.37	9.30				6,925.2	2 1,845.9			
0.70			0.10	0.9093	72.62		1.63									- ,				
0.70	0.00	0.15	0.15	0.9014	52.41		1.39													
0.70					38.50		1.14									- ,				
0.80					86.52		1.45													
0.80		0.10			61.86		1.21	27.72								- ,				
0.80					45.05		0.96													
0.90					73.36		1.03									- ,				
0.91					72.18		0.99													
0.86					56.31		0.95													
0.81					44.38		0.92													
0.76							0.88									-,				
0.87							1.16									- ,				
0.82							1.12									-,				
0.77							1.09													
0.72		0.08			37.41		1.06									- ,	,			
0.67		0.08			29.98		1.02													
0.83		0.12			82.30		1.33													
0.78					63.86		1.29									- ,				
0.73					50.06 39.64		1.26													
0.63		0.12			39.64		1.23									-,	,			
0.63					87.99		1.19													
0.79							1.46													
0.74					53.22		1.43													
0.64					42.03		1.40													
0.59					33.52		1.36													
0.75							1.66													
0.70							1.63													
0.65							1.60									- ,				
0.60					44.60		1.57													
0.55					35.47		1.53									- ,	, , , , , ,			
0.46							1.67													
0.10							1.22													
0.10					65.25		1.36										1,845.5			
0.10			0.10	0.9186	123.08		1.50									,				

Petróleo A	Petróleo B	Petróleo C	Petróleo D	Densidad e relativa 60°F/60° F	Visc.cin. a 25°C [cSt]	IAT cru [mgKOH/ g]	IAT DP [mgKOH/ g]	Rend DLI [%vol]	Enxofre DLP [%m]	Rend GC [%vol]	Rend NFT [%vol]	Rend QRS [%vol]	Rend GO [%vol]	Rend RV [%vol]	Rend RAT [%vol]	Vazão real [gpm]	Head real	Pressão desc [psi]	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	Potência Bomba #3 [MW]
0.2	0.5	50 0.00	0.30	0.8873	33.59	0.77	1.13	31.80	0.39	9 1.00	16.60	9.10	21.53	3 19.9	7 41.50	6,916.6	1,843.8	849.7	2.46	6 0.60
0.2	20 0.6	60 0.00	0.20	0.9020	58.97	0.88	1.28	31.28	3 0.45	5 0.84	14.08	8.20	23.14	1 22.40	5 45.60	6,127.7	1,849.0	852.1	4.27	7 0.58
0.2					109.99		1.42									,	,			
0.3					30.72		1.04										,			
0.3					53.40		1.19									-,				
0.3					98.50		1.34									-,				
0.4					48.44		1.10													
0.4					88.39		1.25									- ,	,			
0.5					44.02		1.01													
0.5					79.47		1.17													
0.6					40.07		0.92										,			
0.6					71.59 36.54		0.81													
0.7					64.62		0.81													
0.7					58.44		0.98													
0.0																				
0.1																,				
0.1																				
0.1																				
0.1					36.79		1.22													
0.2					109.99		1.42									- ,	,	834.7		
0.2					79.90		1.35													
0.2	20 0.6	50 0.00	0.20	0.9020	58.97	0.88	1.28	31.28	3 0.4:	5 0.84	14.08	8.20	23.14			6,127.7	7 1,849.0	852.1	4.2	7 0.58
0.2	20 0.5	55 0.00	0.25	0.8946	44.19	0.82	1.21	31.54	1 0.42	2 0.92	2 15.34	4 8.65	5 22.34	4 21.2	2 43.55	6,564.1	1,850.2	852.5	3.04	4 0.59
0.2	20 0.5	50 0.00	0.30	0.8873	33.59	0.77	1.13	31.80	0.39	9 1.00	16.60	9.10	21.53	3 19.9	7 41.50	6,916.6	5 1,843.8	849.7	7 2.40	6 0.60
0.3	30 0.0	50 0.00	0.10	0.9147	98.50	0.92	1.34	30.38	3 0.50	0.74	11.93	3 7.50	24.5	3 24.8	7 49.45	5,129.0	1,820.7	840.1	38.3	7 0.56
0.3	30 0.5	55 0.00	0.15	0.9074	71.96		1.27			7 0.82	2 13.19	7.95				,	7 1,843.1			
0.3	30 0.5	50 0.00	0.20		53.40		1.19	30.90	0.4	4 0.90						,				2 0.59
0.3					40.22															
0.3							1.04													
0.4					122.27		1.33													
0.4					88.39		1.25													
0.4					64.93		1.18													
0.4					48.44															
0.4																- ,	,			
0.5																, ,				
0.5					79.47 58.70															
0.5					44.02		1.09	30.14								,	,			
0.5					33.48		0.93											850.7		
0.5	0.2	J 0.00	0.23	0.0000	33.48	0.04	0.93	30.40	0.4	1.10	10.43	9.23	21.83	20.9	5 4Z.8U	, 0,910.4	+ 1,040.1	0.00.7	2.43	0.00

Petróleo A	Petróleo B	Petróleo C	Petróleo D	Densidad e relativa 60°F/60° F	Visc.cin. a 25°C [cSt]	IAT cru [mgKOH/ g]	IAT DP [mgKOH/ g]	Rend DLF [%vol]	Enxofre DLP [%m]	Rend GC [%vol]	Rend NFT [%vol]	Rend QRS [%vol]	Rend GO [%vol]	Rend RV [%vol]	Rend RAT [%vol]	Vazão real [gpm]	Head real [ft]	Pressão desc [psi]	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	Potência Bomba #3 [MW]
0.60	0.35	0.00	0.05	0.9163	97.92	0.79	1.15			2 0.84	11.78	7.65	24.88	25.88	3 50.75	5,128.7	1,823.2	841.2	34.67	0.56
0.60	0.30	0.00	0.10	0.9089	71.59	0.74	1.08	29.24	0.49	0.92	13.04	8.10	24.07	24.63	3 48.70	5,772.9	1,845.5	850.6	6.16	0.58
0.60	0.25	0.00	0.15	0.9016	53.17	0.68	1.00	29.50	0.40	5 1.00	14.30	8.55	5 23.27	23.39	46.65	6,278.0	1,853.5			
0.60					40.07		0.92									- ,	,			
0.60				0.8869	30.63		0.83													
0.70				0.9143	87.89		1.06									- ,				
0.70					64.62		0.98													
0.70					48.24		0.90									-,				
0.70					36.54		0.81									,				
0.80				0.9124	79.05		0.97									- ,				
0.80					58.44		0.88													
0.80		0.00		0.07	43.85		0.80									- ,	,			
0.90					71.23		0.87													
0.83					75.02		0.92									- ,				
0.80					58.44		0.88													
0.7					45.98		0.85													
0.70					36.54		0.81													
0.7					83.33		1.01													
0.70																				
0.6																				
0.6				0.8942	40.07		0.92													
0.55				0.8879	32.02		0.88		0.40								,			
0.65				0.9153	92.74		1.11	28.79								- ,	,			
0.60				0.9089	71.59		1.08									,	,			
0.55					55.85		1.04									-, -				
0.50					44.02 35.03		1.01													
0.45				0.8898			0.98									-,				
0.55				0.9172	103.43		1.20									- ,				
0.50					79.47															
0.45					61.72		1.14													
0.40					48.44		1.10													
0.33					38.39		1.07													
0.30					30.72		1.04									.,.	,			
0.43					115.58		1.29													
0.40					88.39		1.25									- ,				
0.33					68.34		1.22										1,845.7			
0.30					53.40		1.19													
0.2					42.15		1.16													
0.20					33.59		1.13													
0.3	0.60	0.00	0.10	0.9147	98.50	0.92	1.34	30.38	0.50	0.74	11.93	7.50	24.58	24.87	7 49.45	5,129.0	1,820.7	840.1	38.37	0.56

Petról A	leo	Petróleo B	Petróleo C	Petróleo D	Densidad e relativa 60°F/60° F	Visc.cin. a 25°C [cSt]	[mgKOH/	IAT DP [mgKOH/ g]	Rend DLF [%vol]	Enxofre DLP [%m]	Rend GC [%vol]	Rend NFT [%vol]	Rend QRS [%vol]	Rend GO [%vol]	Rend RV [%vol]	Rend RAT [%vol]	Vazão real [gpm]	Head real [ft]	Pressão desc [psi]	Potência Bombas #1 e #2 [MW]	Potência Bomba #3 [MW]
	0.25	0.60	0.00	0.15	0.9083	75.81	0.90	1.31	30.83	0.48	0.79	13.01	7.85	5 23.86	5 23.67	47.53	5,679.4	1,840.1	1 848.3	7.17	0.57
	0.20	0.60	0.00	0.20	0.9020	58.97	0.88	1.28	31.28	0.45	0.84	14.08	8.20	23.14	22.46	45.60	6,127.7	1,849.0	852.1	4.27	0.58
	0.15	0.60	0.00	0.25	0.8956	46.35	0.85	1.25	31.73	0.42	0.89	15.16	8.55	5 22.42	21.26	43.68	6,498.7	1,850.2	2 852.5	3.18	0.59
	0.10	0.60	0.00	0.30	0.8892	36.79	0.83	1.22	32.18	0.40	0.94	16.23	8.90	0 21.70	20.05	41.75	6,809.0	1,845.8	850.6	2.62	0.60
	0.20	0.70	0.00	0.10	0.9167	109.99	0.98	1.42	30.76	0.51	0.68	11.56	7.30	0 24.75	24.95	49.70	4,871.7	1,808.1	1 834.7	-37.22	0.56
	0.15	0.70	0.00	0.15	0.9103	84.25	0.96	1.39	31.21	0.48	0.73	12.64	7.6	5 24.03	3 23.75	47.78	5,473.9	1,832.8	8 845.2	10.45	0.57
	0.10	0.70	0.00	0.20	0.9039	65.25	0.94	1.36	31.66	0.45	0.78	13.71	8.00	0 23.31	22.54	45.85	5,960.1	1,845.5	5 850.6	5.06	0.58
	0.05	0.70	0.00	0.25	0.8975	51.06	0.92	1.33	32.11	0.43	0.83	14.79	8.3	5 22.59	21.34	43.93	6,360.2	1,849.5	5 852.2	3.53	0.59
	0.10	0.80	0.00	0.10	0.9186	123.08	3 1.04	1.50	31.14	0.51	0.62	11.19	7.10	0 24.92	2 25.03	49.95	4,587.1	1,792.7	7 828.2	-11.86	
	0.05	0.80	0.00	0.15	0.9122	93.83	3 1.02	1.47	31.59	0.48	0.67	12.27	7.4:	5 24.20	23.83	48.03	5,249.4	1,823.5	5 841.3	20.69	0.56

### ANEXO A: PROVA DO TEOREMA E DO COROLÁRIO 2-1 APRESENTADO POR BEN-HAIM (2000).

#### Prova do Teorema 2-1

1. Desde que  $\hat{\alpha}(q,r_1)$  e  $\hat{\alpha}(q,r_2)$  existem e são positivos, os conjuntos de valores de  $\alpha \, \mathcal{R}(q,r_1)$  e  $\mathcal{R}(q,r_2)$  são limitados e não vazios. Se  $\alpha \in \mathcal{R}(q,r_2)$ , significa que:  $\min_{\upsilon \in \ell(\alpha,\widetilde{\upsilon})} R(q,\upsilon) \geq r_2 > r_1 \tag{A.1}$ 

A partir do que pode-se concluir que o mesmo  $\alpha$  também pertence a  $\mathcal{A}(q,r_1)$ . Portanto,

$$\mathcal{A}(q, r_2) \subseteq \mathcal{A}(q, r_1) \tag{A.2}$$

Como  $\hat{\alpha}(q,r_{_{n}})$  é o maior mínimo do conjunto  $\mathcal{R}(q,r_{_{n}})$ , então E.2 implica que

$$\hat{\alpha}(q, r_1) \ge \hat{\alpha}(q, r_2) \tag{A.3}$$

2. Pelo Lema 1, sabe-se que

$$\min_{\upsilon \in \ell(\hat{\alpha}(q,r_1),\tilde{\upsilon})} R(q,\upsilon) = r_1 \tag{A.4}$$

por um argumento similar, temos que:

$$\min_{\upsilon \in \ell(\hat{\alpha}(q,r_2),\tilde{\omega})} R(q,\upsilon) = r_2 \tag{A.5}$$

3. Agora, suponha que, adicionalmente a relação (A.3), a seguinte seja válida:

$$\hat{\alpha}(q, r_1) = \hat{\alpha}(q, r_2) \tag{A.6}$$

Porém, pela suposição do teorema, os termos à direita das equações (A.4) e (A.5) são diferentes ( $r_1 < r_2$ ). Portanto os termos á esquerda dessas equações devem ser também diferentes. Então  $\hat{\alpha}(q,r_1)$  e  $\hat{\alpha}(q,r_2)$  não podem ser iguais e a suposição em (A.6) é falsa e a estrita desigualdade na equação 2.13 resulta da relação (A.3)

**Lema 1**: Se R(q, v) é uniformemente contínua e se a função robustez  $\hat{\alpha}(q,r)$  existe e é finita, então:

$$\min_{\nu \in \ell(\hat{\alpha}(q,r),\tilde{\nu})} R(q,\nu) = r \tag{A.7}$$

o que acontece se  $\hat{\alpha}(q,r)$  é robustez para a recompensa crítica r, então a recompensa mínima em um modelo de falta de informação de tamanho  $\hat{\alpha}(q,r)$  equivale a r.  $\Box$ 

Prova do Lema 1. Sabe-se pela equação 2.7,

$$\min_{\upsilon \in \ell(\hat{\alpha}(q,r),\tilde{\upsilon})} R(q,\upsilon) \ge r \tag{A.9}$$

Entretanto, suponha que a desigualdade estrita seja válida:

$$\min_{\upsilon \in \ell(\hat{\alpha}(q,r),\tilde{\upsilon})} R(q,\upsilon) > r \tag{A.10}$$

Desde que R(q, v) é uniformemente contínua e  $\mathfrak{T}(\alpha, \tilde{v})$  é uma família de conjuntos contidos entre si hierarquiarmente, então há um  $\beta > \hat{\alpha}(q, r)$  tal que

$$\min_{\upsilon \in \ell(\beta, \tilde{\upsilon})} R(q, \upsilon) > r \tag{A.11}$$

Porém isto é uma contradição, dado que  $\hat{\alpha}(q,r)$ é o máximo valor do conjunto  $\mathcal{A}(q,r)$ . Portanto, a desigualdade (A.9) não pode ser verdadeira e sim a identidade (A.7), o que prova o lema.

Prova do Corolário 2-1. Pelo Teorema 2-1, sabe-se que

$$\hat{\alpha}(\hat{q}_c(r_1), r_1) > \hat{\alpha}(\hat{q}_c(r_2), r_2) \tag{A.12}$$

mas pela definição da robustez máxima, equação 2.9:

$$\hat{\alpha}(\hat{q}_c(r_1), r_1) \geq \hat{\alpha}(\hat{q}_c(r_2), r_1)$$

As últimas duas relações provam o resultado desejado.

### ANEXO B: PROVA DO TEOREMA E DO COROLÁRIO 2-2, APRESENTADO POR BEN-HAIM (2000).

**Prova do Teorema 2-2.** Desde que  $\zeta(x)$  é uma função crescente, o Teorema 2-2 resulta imediatamente do Lema 2 (B.3) e o Teorema 2-1 (Equação 2.13).  $\Box$ 

Prova do Corolário 2-2. Pelo Teorema 2-2

$$\hat{\beta}(\hat{q}_w(r_2), r_1) < \hat{\beta}(\hat{q}_w(r_2), r_2) \tag{B.1}$$

mas pela definição de oportunidade ótima, equação 2.12

$$\hat{\beta}(\hat{q}_{w}(r_{1}), r_{1}) \le \hat{\beta}(\hat{q}_{w}(r_{2}), r_{1}) \tag{B.2}$$

as últimas duas relações provam o resultado desejado.

Lema 2: As funções oportunidade e robustez estão relacionados entre por

$$\hat{\beta}(q,r) = \hat{\alpha}(q,R(q,\tilde{\upsilon}) - \overline{\zeta}[r - R(q,\tilde{\upsilon})])$$
(B.3)

Prova do Lema 2. Definindo as funções abaixo

$$\mu_{1}(\alpha,q) = \min_{\upsilon \in C(\alpha,\upsilon)} R(q,\upsilon), \qquad \mu_{2}(\alpha,q) = \max_{\upsilon \in C(\alpha,\upsilon)} R(q,\upsilon)$$
 (B.4)

as quais atendem as seguintes propriedades:

- a)  $\mu_1(0, q) = \mu_2(0, q) = R(q, \tilde{\upsilon})$ , porque  $\mathfrak{T}(0, \tilde{\upsilon})$  é o conjunto unitário  $\{\tilde{\upsilon}\}$ ;
- b)  $\mu_I(\alpha,q)$  decresce monotonicamente em relação a  $\alpha$  e a função robustez  $\hat{\alpha}(q,r)$  é solução (para  $\alpha$ ) de

$$\mu_1(\alpha, q) = r \tag{B.5}$$

c)  $\mu_2(\alpha, q)$  cresce monotonicamente em relação a  $\alpha$  e a função oportunidade  $\hat{\beta}(q, r)$  é a solução (para  $\beta$ ) de

$$\mu_2(\beta, q) = r \tag{B.6}$$

d) Considerando  $\mu_I(\alpha, q)$  e  $\mu_2(\alpha, q)$  como funções de  $\alpha$ , as propriedades (a)-(c) mostram que  $\mu_I$  e  $\mu_2$  são "fracamente simétricas" em relação ao valor  $R(q, \tilde{v})$ : o gráfico de  $\mu_2$  vs.  $\alpha$  cresce monotonicamente com  $R(q, \tilde{v})$ , enquanto  $\mu_I$  vs.  $\alpha$  decresce monotonicamente em relação a  $R(q, \tilde{v})$ . Em outras palavras, há uma função crescente  $\zeta(x)$  tal que  $\zeta(0) = 0$  e

$$\mu_{2}(\alpha, q) = R(q, \tilde{\upsilon}) + \zeta [R(q, \tilde{\upsilon}) - \mu_{1}(\alpha, q)]$$
(B.7)

Isto algumas vezes acontece quando  $\zeta(x)=x$ , implicando que  $\mu_1$  e  $\mu_2$  são "fortemente simétricas" em relação ao valor  $R(q,\tilde{v})$ . Denota-se a inversa da função x por  $\overline{\zeta}[\zeta(x)]=x$ .

Lembrando que a equação (B.6) afirma que

$$\mu_2(\hat{\beta}(q,r),q) = r \tag{B.8}$$

a partir da equação (B.7), pode-se substituir o lado esquerdo da equação (B.8) por

$$R(q,\widetilde{\upsilon}) + \zeta \left[ R(q,\widetilde{\upsilon}) - \mu_1 \left( \hat{\beta}(q,r), q \right) \right] = r$$
(B.9)

rearranjando e invertendo a função ζ, tem-se:

$$\mu_1(\hat{\beta}(q,r),q) = R(q,\tilde{\upsilon}) + \overline{\zeta}[r - R(q,\tilde{\upsilon})] \tag{B.10}$$

Comparando as equações (B.5) e (B.10), obtém-se a relação pretendida (B.4).  $\ \Box$ 

### ANEXO C: PROVA DO TEOREMA 2-3 E COROLÁRIO 2-5, APRESENTADO POR BEN-HAIM (2000).

Prova do Teorema 2-3. Pelo Lema 1 (E.7), sabe-se que

$$\min_{\upsilon \in \ell(\hat{\alpha}(q,r),\tilde{\upsilon})} R(q,\upsilon) = r \tag{C.1}$$

por conveniência, seja  $\hat{\alpha}_1=\hat{\alpha}_1(q,r)$ . A partir das relações 2.17 e 2.18, conclui-se que

$$\min_{\upsilon \in \ell_2[(1+\varepsilon)\hat{\alpha},\tilde{\upsilon}]} \frac{1}{1+\delta} R_2(q,\upsilon) \ge \min_{\upsilon \in \ell_2(\hat{\alpha},\tilde{\upsilon})} \frac{1}{1+\delta} R_1(q,\upsilon) = r \tag{C.2}$$

Portanto,

$$\min_{\upsilon \in \ell_{1}[(1+\varepsilon)\hat{\alpha},\tilde{\upsilon}]} R_{2}(q,\upsilon) \ge (1+\delta)r \tag{C.3}$$

Recordando as definições expressas pelas equações 2.7 e 2.8, conclui-se que a robustez do tomador de decisão 2 para a recompensa crítica  $(1 + \delta)r$ , é não menor do que  $(1 + \varepsilon)\hat{\alpha}_1$ :

$$(1+\varepsilon)\hat{\alpha}_1(q,r) \le \hat{\alpha}_2[q,(1+\delta)r] \tag{C.4}$$

também pelo Teorema 2-1,

$$\hat{\alpha}_{2}[q,(1+\delta)r] \leq \hat{\alpha}_{2}(q,r) \tag{C.5}$$

a qual torna-se uma desigualdade estrita se  $\delta > 0$ . As últimas duas relações completam a prova da relação 2.19.  $\hfill\Box$ 

**Prova do Corolário 2-5.** Sejam  $\hat{\alpha}_1$  a robustez para o tomador de decisão 1 usando a função recompensa  $R_I$ , e  $\hat{\alpha}_1^*$  a robustez correspondente ao uso da função recompensa  $R_I$ \*. Pelo Lema 1

$$\min_{v \in \ell_2(\hat{\alpha}_1, \tilde{v})} R_1 = r \tag{C.6}$$

Pelo Teorema 3

$$\hat{\alpha}_1(q,r) \le \hat{\alpha}_2(q,r) \tag{C.7}$$

Então

$$\min_{v \in \ell_1(\hat{\alpha}_2, \tilde{v})} R_1 \le \min_{v \in \ell_1(\hat{\alpha}_1, \tilde{v})} R_1 \tag{C.8}$$

Seja  $\Delta$  o excesso da parcela do lado direito em relação a parcela do lado esquerdo da inequação (C.8), a qual é finita desde que  $\hat{\alpha}_1$  existe. Considerando que o tomador de decisão 1 escolha uma nova função recompensa  $R_I^*$  tal que,

$$R_1^* > \Delta + R_1 \tag{C.9}$$

Então

$$\min_{v \in \ell_1(\hat{\alpha}_2, \tilde{v})} R_1^* > \Delta + \min_{v \in \ell_1(\hat{\alpha}_2, \tilde{v})} R_1 = r \tag{C.10}$$

Desta forma, pode-se concluir que a nova robustez do tomador de decisão 1 diante de i,a recompensa critica r é maior do que  $\hat{\alpha}_2$ :

$$\hat{\alpha}_1^*(q,r) > \hat{\alpha}_2(q,r) \tag{C.11}$$

o que completa a prova.  $\Box$ 

# ANEXO D: PROCEDIMENTO DE ANÁLISE DA QUALIDADE DOS PARÂMETROS ESTIMADOS, SEGUNDO SCHWAAB e PINTO (2007).

Para avaliar a qualidade dos parâmetros estimados, é fundamental determinar a matriz covariância paramétrica  $V_{\phi}$ , que pode ser deduzida como segue. Sabe-se que no ponto de mínimo da função objetivo com os parâmetros ótimos  $\hat{\phi}$ , a seguinte relação deve ser satisfeita (SCHWAAB e PINTO, 2007):

$$\nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} (\mathbf{y}^e, \mathbf{x}^e, \hat{\varphi}) = \mathbf{0}$$
 (D.1)

Expandindo em séries de Taylor e truncado até o termo da primeira derivada, por serem todos os erros pequenos:

$$\nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left( \mathbf{y}^{e} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{Y}}, \mathbf{x}^{e} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{X}}, \hat{\varphi} + \delta \varphi \right) \approx \nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left( \mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi} \right) + \frac{\partial \left[ \nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left( \mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi} \right) \right]}{\partial \mathbf{y}^{e}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{Y}} + \frac{\partial \left[ \nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left( \mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi} \right) \right]}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{X}} + \frac{\partial \left[ \nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left( \mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi} \right) \right]}{\partial \varphi} \cdot \delta \varphi \approx \mathbf{0}$$
(D.2)

Definindo que:

$$\mathbf{G}_{\mathbf{Y}} = \frac{\partial \left[\nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left(\mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi}\right)\right]}{\partial \mathbf{y}^{e}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial y_{1,1}^{e}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial y_{1,2}^{e}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial y_{NE,NY}^{e}} \\ \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial y_{1,1}^{e}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial y_{1,2}^{e}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial y_{NE,NY}^{e}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial y_{1,1}^{e}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial y_{1,2}^{e}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial y_{NE,NY}^{e}} \end{bmatrix}$$
(D.3)

$$\mathbf{G}_{\mathbf{X}} = \frac{\partial \left[\nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left(\mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi}\right)\right]}{\partial \mathbf{x}^{e}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial x_{1,1}^{e}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial x_{1,2}^{e}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial x_{NE,NX}^{e}} \\ \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial x_{1,1}^{e}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial x_{1,2}^{e}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial x_{NE,NX}^{e}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial x_{1,1}^{e}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial x_{1,2}^{e}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial x_{NE,NX}^{e}} \end{bmatrix}$$
(D.4)

$$\mathbf{H}_{\varphi} = \frac{\partial \left[\nabla_{\hat{\varphi}} F_{obj} \left(\mathbf{y}^{e}, \mathbf{x}^{e}, \hat{\varphi}\right)\right]}{\partial \varphi} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial \varphi_{1}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial \varphi_{2}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{1} \partial \varphi_{NP}} \\ \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial \varphi_{1}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial \varphi_{2}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{2} \partial \varphi_{NP}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial \varphi_{1}} & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial \varphi_{2}} & \cdots & \frac{\partial^{2} F_{obj}}{\partial \varphi_{NP} \partial \varphi_{NP}} \end{bmatrix}$$

$$(D.5)$$

Chega-se a:

$$G_{Y}.\epsilon_{Y}+G_{X}.\epsilon_{X}+H_{\varphi}.\delta\varphi=0 \tag{D.6}$$

isolando o termo  $\delta \varphi$ :

$$\delta \mathbf{\varphi} = -\mathbf{H}_{\mathbf{\varphi}}^{-1} \cdot [\mathbf{G}_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{\varepsilon}_{\mathbf{Y}} + \mathbf{G}_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{\varepsilon}_{\mathbf{X}}]$$

Pela definição de variância e sabendo-se que a matriz hessiana  $\mathbf{H}_{\phi}$  sempre é simétrica e, portanto,  $\mathbf{H}_{\phi}^{T} = \mathbf{H}_{\phi}^{-1}$ :

$$\mathbf{V}_{\varphi} = \mathbf{E} \{ \delta \boldsymbol{\varphi} \cdot \delta \boldsymbol{\varphi}^{\mathrm{T}} \} = \mathbf{E} \{ (-\mathbf{H}_{\varphi}^{-1} \cdot [\mathbf{G}_{\mathbf{Y}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}} + \mathbf{G}_{\mathbf{X}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{X}}]) \cdot (-\mathbf{H}_{\varphi}^{-1} \cdot [\mathbf{G}_{\mathbf{Y}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}} + \mathbf{G}_{\mathbf{X}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{X}}])^{\mathrm{T}} \} =$$

$$= \mathbf{H}_{\varphi}^{-1} [\mathbf{G}_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{G}_{\mathbf{Y}}^{\mathrm{T}} + 2.\mathbf{G}_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{XY}} \cdot \mathbf{G}_{\mathbf{Y}}^{\mathrm{T}} + \mathbf{G}_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{G}_{\mathbf{X}}^{\mathrm{T}}] \mathbf{H}_{\varphi}^{-1}$$
(D.7)

Admitindo por hipótese os erros das variáveis  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  são independentes entre si, portanto:

$$\mathbf{V}_{\mathbf{X}\mathbf{Y}} = \mathbf{0}:$$

$$\mathbf{V}_{\mathbf{0}} = \mathbf{H}_{\mathbf{0}}^{-1} [\mathbf{G}_{\mathbf{Y}}, \mathbf{V}_{\mathbf{Y}}, \mathbf{G}_{\mathbf{Y}}^{\mathrm{T}} + \mathbf{G}_{\mathbf{X}}, \mathbf{V}_{\mathbf{X}}, \mathbf{G}_{\mathbf{X}}^{\mathrm{T}}] \mathbf{H}_{\mathbf{0}}^{-1}$$
(D.8)

A partir da matriz covariância paramétrica  $V_{\phi}$  é possível estimar o intervalo de confiança dos parâmetros. Admitindo-se a perfeita aderência da hipótese de distribuição de probabilidade normal, pode-se avaliar se o parâmetro em estudo é ou não é significativo. Se o nível de confiança necessário para incluir o zero é inferior ao estipulado pelo usuário, diz-se que o parâmetro é não significativo. Nesse caso, há argumentos estatísticos suficientes para descartar o referido parâmetro do modelo (SCHWAAB e PINTO, 2007).

De forma análoga à equação G.2, define-se o coeficiente de correlação paramétrica como:

$$\rho_{i,j}^{\varphi} = \frac{v_{i,j}^{\varphi}}{\sqrt{v_{i,i}^{\varphi} \cdot v_{j,j}^{\varphi}}} \tag{D.9}$$

onde  $v^{\phi}_{ij}$  é o elemento da linha i e coluna j da matriz  $\mathbf{V}_{\phi}$ . Quanto mais próximos de zero estiverem os coeficientes de correlação paramétrica, mais eficientes serão os procedimentos de estimação de parâmetros e mais precisa será a identificação do efeito de cada parâmetro do modelo.

Para  $\rho_{i,j}^{\varphi} > 0,9$ , recomenda-se que uma revisão do modelo, de forma a tornar os parâmetros o mais independentes entre si, por meio de estratégias de reparametrização. Correlações elevadas podem levar a matriz covariância paramétrica a tornar-se mal-condicionada e não inversível, o que prejudica todas as análises propostas (SCHWAAB e PINTO, 2007).

# ANEXO E: PROCEDIMENTO PARA ANÁLISE DA QUALIDADE DAS PREVISÕES DO MODELO AJUSTADO, SEGUNDO SCHWAAB e PINTO (2007).

Para estimar a propagação de erros experimentais até os erros de predição do modelo, contornando a necessidade de um cálculo sistemático de todos as possíveis predições associadas com a nuvem de incerteza dos parâmetros, pode-se estimar a matriz covariância de erros de predição do modelo através das aproximações apresentadas a seguir. Considerando um modelo perfeito, o único motivo de não serem observados experimentalmente os valores preditos pelo modelo é o erro experimental. Assim pode-se definir que (SCHWAAB e PINTO, 2007, p.274):

$$\mathbf{y}^{e} = \mathbf{y}^{m}(\mathbf{x}^{m} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{X}}, \boldsymbol{\varphi} + \delta \boldsymbol{\varphi}) + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{Y}} = f(\mathbf{x}^{m} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{X}}, \hat{\boldsymbol{\varphi}} + \delta \boldsymbol{\varphi}) + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{Y}}$$
(E.1)

se os erros são pequenos, a aproximação linear é válida.

$$\mathbf{y}^{e} = f\left(\mathbf{x}^{m}, \hat{\varphi}\right) + \frac{\partial f\left(\mathbf{x}^{m}, \hat{\varphi}\right)}{\partial \varphi} \cdot \delta\varphi + \frac{\partial f\left(\mathbf{x}^{m}, \hat{\varphi}\right)}{\partial \mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{X}} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{Y}}$$
(E.2)

então

$$\delta \mathbf{y} = \frac{\partial f(\mathbf{x}^m, \hat{\varphi})}{\partial \varphi} \cdot \delta \varphi + \frac{\partial f(\mathbf{x}^m, \hat{\varphi})}{\partial \mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{X}} + \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{Y}}$$
(E.3)

Definindo **B**, como a matriz de sensibilidade:

$$\mathbf{B} = \frac{\partial f(\mathbf{x}^m, \hat{\boldsymbol{\varphi}})}{\partial \boldsymbol{\varphi}} + \frac{\partial f(\mathbf{x}^m, \hat{\boldsymbol{\varphi}})}{\partial \mathbf{x}}$$
 (E.4)

portanto 
$$\delta \mathbf{y} = \mathbf{B} \cdot \delta \xi + \mathbf{\varepsilon}_{Y};$$
 onde  $\xi = \{ \varphi, \mathbf{x}^{m} \}$  (E.5)

e a variância dos erros de predição do modelo  ${\bf V_Y}^{\rm m}$  é definido por (SCHWAAB e PINTO, 2007):

$$\mathbf{V}_{\mathbf{Y}}^{\mathbf{m}} = \mathrm{E}\{\delta \mathbf{y}. \ \delta \mathbf{y}^{\mathbf{T}}\} = \mathrm{E}\{(\mathbf{B}. \ \delta \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}}). \ (\mathbf{B}. \ \delta \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}})^{\mathbf{T}}\} =$$

$$= \mathrm{E}\{\mathbf{B}\delta \boldsymbol{\xi}. \ \delta \boldsymbol{\xi}^{\mathbf{T}} \ \mathbf{B}^{\mathbf{T}} + \mathbf{B}\delta \boldsymbol{\xi}. \ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}}^{\mathbf{T}} + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}}. \ \delta \boldsymbol{\xi}^{\mathbf{T}} \ \mathbf{B}^{\mathbf{T}} + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}}. \ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}}^{\mathbf{T}}\} =$$

$$= \mathbf{B}.\mathbf{V}_{\boldsymbol{\xi}}.\mathbf{B}^{\mathbf{T}} + \mathbf{B}. \ \operatorname{Covar}(\delta \boldsymbol{\xi}. \ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}}) + \operatorname{Covar}(\delta \boldsymbol{\xi}. \ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{Y}}). \ \mathbf{B}^{\mathbf{T}} + \mathbf{V}_{\mathbf{Y}}$$
(E.6)

Admitindo que os erros experimentais e paramétricos são todos independentes entre si,  $Covar(\delta \xi, \varepsilon_Y) = 0$ :

$$\mathbf{V}_{\mathbf{Y}}^{\mathbf{m}} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{V}_{\xi} \cdot \mathbf{B}^{\mathbf{T}} + \mathbf{V}_{\mathbf{Y}} \tag{E.7}$$

É possível definir um intervalo de confiança usando a função *t*-Student para as predições do modelo. Uma utilidade para equação G.8, consiste na realização do teste *F* para verificar se a variância experimental é estatisticamente equivalente à variância de predição do modelo a um certo nível de confiança.

# ANEXO F: DEMONSTRAÇÃO DA DEPENDÊNCIA DO PONTO DE DIMENSIONAMENTO ÓTIMO EM RELAÇÃO ÀS INCERTEZAS PARAMÉTRICAS (PINTO, 1998).

Seja uma função objetivo de lucro esperado  $L(z, w, \alpha)$  a ser maximizada, onde z, w e  $\alpha$  são vetores de variáveis de decisão (que serão manipuladas durante a otimização), variáveis fixas (que permanecerão fixas durante a otimização) e parâmetros do modelo, respectivamente. Portanto, a otimização, aqui, significa buscar valores ótimos para as variáveis de decisão z, cuja condição ótima é denotada por  $L(z^*, w, \alpha)$ . Considerando que o problema esteja sujeito às incertezas sobre os três tipos de variáveis, não é possível definir exatamente a solução ótima real  $L(z^*, w, \alpha)$ . Assumindo que os desvios das variáveis em relação aos seus valores nominais ótimos sejam pequenos, pode-se afirmar que a relação abaixo é válida (PINTO, 1998):

$$\nabla_z L(z^* + \Delta z^*, w + \varepsilon_w, \alpha + \varepsilon_\alpha) = 0$$
 (F.1)

onde  $z^*$  é o ponto ótimo das variáveis de decisão,  $\varepsilon_x$  é o desvio de uma variável genérica x em relação à condição nominal. A Equação (F.1) pode ser reescrita como,

$$\left(\nabla_{z,z}^{2}L\right)\Delta z * + \left(\nabla_{z,w}^{2}L\right)\varepsilon_{w} + \left(\nabla_{z,\alpha}^{2}L\right)\varepsilon_{\alpha} = 0 \tag{F.2}$$

então,

$$\Delta z^* = -\left(\nabla_{z,z}^2 L\right)^{-1} \left\{ \left(\nabla_{z,w}^2 L\right) \varepsilon_w + \left(\nabla_{z,\alpha}^2 L\right) \varepsilon_\alpha \right\}$$
 (F.3)

A Equação (F.3) prova que pequenos desvios das variáveis fixas w e dos parâmetros do modelo  $\alpha$  causam pequenos desvios no ponto ótimo, ou seja, ao não se conhecer os valores exatos de w e de  $\alpha$  devido às incertezas inerentes da medição, não é possível saber exatamente o ponto ótimo  $z^*$  (PINTO, 1998).

Consequentemente, surge também incertezas sobre o lucro ótimo, cujo desvio  $\Delta L^*$  pode ser calculado em função do desvio das variáveis de decisão  $z^*$ , como se pode observar abaixo (PINTO, 1998):

$$\Delta L^* = L(z^* + \varepsilon_z + \Delta z^*, w + \varepsilon_w, \alpha + \varepsilon_\alpha) - L(z^*, w, \alpha) =$$

$$= (\nabla_z L)^T (\varepsilon_z + \Delta z^*) + (\nabla_w L)^T \varepsilon_w + (\nabla_\alpha L)^T \varepsilon_\alpha +$$

$$+ \frac{1}{2} (\varepsilon_z + \Delta z^*)^T (\nabla_{z,z}^2 L) (\varepsilon_z + \Delta z^*) + \frac{1}{2} (\varepsilon_w)^T (\nabla_{w,w}^2 L) (\varepsilon_w) +$$

$$+ \frac{1}{2} (\varepsilon_\alpha)^T (\nabla_{\alpha,\alpha}^2 L) (\varepsilon_\alpha) + \frac{1}{2} (\varepsilon_z + \Delta z^*)^T (\nabla_{z,w}^2 L) (\varepsilon_w) +$$

$$+ \frac{1}{2} (\varepsilon_z + \Delta z^*)^T (\nabla_{z,\alpha}^2 L) (\varepsilon_\alpha) + \frac{1}{2} (\varepsilon_w)^T (\nabla_{w,\alpha}^2 L) (\varepsilon_\alpha) + \dots$$
(F.4)

Substituindo (F.3) em (F.4) e calculando a média do desvio do lucro ótimo, obtém-se (PINTO, 1998):

$$\overline{\Delta L}^{\overline{*}} = \sum_{i=1}^{NZ} \sum_{j=1}^{NZ} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L}{\partial z_i \partial z_j} \sigma_{zij}^2 + \sum_{i=1}^{NW} \sum_{j=1}^{NW} \frac{1}{2} g_{ij} \sigma_{wij}^2 + \sum_{i=1}^{N\alpha} \sum_{j=1}^{N\alpha} \frac{1}{2} h_{ij} \sigma_{\alpha ij}^2$$
 (F.5)

que representa o prejuízo médio causado pelo processo não operar na condição ótima real devido a presença das incertezas. Os termos  $g_{ij}$  e  $h_{ij}$  são definidos como (PINTO, 1998):

$$G = \left[ g_{ii} \right]_{\text{NW} \sim \text{NW}} = \left( \nabla_{w,w}^2 L \right) - \left( \nabla_{z,w}^2 L \right)^T \left( \nabla_{z,z}^2 L \right)^{-1} \left( \nabla_{z,w}^2 L \right)$$
 (F.6)

$$H = \left[ h_{ii} \right]_{N\alpha \times N\alpha} = \left( \nabla_{\alpha,\alpha}^2 L \right) - \left( \nabla_{z,\alpha}^2 L \right)^T \left( \nabla_{z,z}^2 L \right)^{-1} \left( \nabla_{z,\alpha}^2 L \right)$$
 (F.7)

Lembrando que os desvios de variáveis são centrados em zero e todas as derivadas são calculadas na condição ótima nominal. As Equações (F.3) e (F.5) provam que as variâncias das variáveis de decisão, fixas e dos parâmetros afetam diretamente o projeto e o lucro associado.

### ANEXO G: PROCEDIMENTO PARA ANÁLISE DA QUALIDADE DO AJUSTE DO MODELO SEGUNDO SCHWAAB e PINTO (2007).

Como foi mostrado no Capítulo 3, as funções de máxima verossimilhança, desenvolvidas a partir da hipótese de erros de medida seguindo a distribuição de probabilidade normal, resulta na Equação (3.11). Foi visto também no Capítulo 3, que estas equações podem ser interpretadas como uma função de  $\chi^2_{\nu}$  com graus de liberdade  $\nu = NY.NE - NP$ 

$$F_{obj} = (Z^* - Z^e)^T \mathbf{V}_z^{-1} (Z^* - Z^e) \equiv \chi_{n-p}^2$$
(G.1)

Neste caso, por meio do teste do qui quadrado a um nível de confiança  $(1 - \alpha)$ , pode-se chegar a três possíveis conclusões:

- $\chi^2_{\nu}^{\alpha/2} \leq F_{obj} \leq \chi^2_{\nu}^{(1-\alpha/2)}$ : Ajuste do modelo representa bem os dados experimentais. Desvios entre o modelo e os dados experimentais flutuam dentro do esperado para uma variável aleatória de distribuição normal a um nível de confiança  $(1-\alpha)$ ;
- $F_{obj} > \chi^2_{\nu}$  (1- $\alpha$ /2): O modelo ajustado não explica bem os erros experimentais, pois os erros de predição são significativamente maiores do que eles. Duas hipóteses são possíveis para explicar tal fato: ou modelo não é adequado e deve ser aperfeiçoado ou os erros experimentais foram consistentemente subestimados durante a medição;
- $F_{obj} < \chi^2_{\nu}^{\alpha/2}$ : O modelo reproduz os dados experimentais muito melhor do que o esperado. Evidência de provável superparametrização do modelo ajustado, o que indica que alguns parâmetros do modelo possam ser descartados. É igualmente possível que os erros experimentais tenham sido consistentemente superestimados durante a medição.

Outra métrica importante para avaliar a qualidade do ajuste do modelo consiste no coeficiente de correlação entre os valores experimentais e calculados pelo modelo, definido como:

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^{NE} \left( z_i^e - \overline{z}_i^e \right) \left( z_i^m - \overline{z}_i^m \right)}{\sqrt{\left[ \sum_{i=1}^{NE} \left( z_i^e - \overline{z}_i^e \right) \right] \cdot \left[ \sum_{i=1}^{NE} \left( z_i^m - \overline{z}_i^m \right) \right]}}$$
(G.2)

onde **Z**<sup>e</sup> é o vetor de medidas experimentais e **Z**<sup>m</sup> é o vetor de resultados obtidos do modelo ajustado. O coeficiente de correlação indica quão proximamente os dados calculados estão correlacionados com os dados experimentais. Geralmente 0,9 indica que os valores preditos pelo modelo variam de forma aproximadamente linear e proporcional com os valores experimentais. Coeficientes de correlação menores do que 0,9 podem indicar tanto desajuste do modelo quanto a alta amplitude dos erros experimentais.

Associando as duas métricas acima citadas pode-se tirar as seguintes conclusões:

- $\chi^2_{\nu}^{\alpha/2} \le F_{obj} \le \chi^2_{\nu}^{(1-\alpha/2)}$  e  $\rho < 0,9$ : Forte indício de que o problema deve-se à alta amplitude dos erros experimentais. Maior número de réplicas deve melhorar a estimativa;
- $\chi_{\nu}^{2} \stackrel{\alpha/2}{\leq} F_{obj} \leq \chi_{\nu}^{2} \stackrel{(1-\alpha/2)}{\leq} e \rho > 0,9$ : Indica que o modelo é adequado.
- $F_{obj} > \chi^2_{\nu}$  (1-\alpha/2) e  $\rho < 0.9$ : Forte indício de que o problema deve-se a má qualidade do modelo. Sugere-se o aprimoramento ou a substituição do modelo, ou mesmo refazer plano experimental;
- $F_{obj} > \chi^2_{\nu}$  (1-\alpha/2) e  $\rho > 0.9$ : Forte **init** de que os erros experimentais foram subestimados;
- $F_{obj} < \chi^2_{\nu}$   $^{\alpha/2}$  e  $\rho < 0.9$ : Forte indício de que os erros experimentais foram superestimados;
- $F_{\it obj} < \chi^2_{\it v}$  a/2 e  $\rho > 0,9$ : Forte indício de superparametrização do modelo adotado;

# ANEXO H: PROVA DO TEOREMA BERRY-ESSEEN, SEGUNDO KOLASSA (1997).

A presente prova será feita por meio do Teorema da Curva suave, *Smoothing Theorem*. A função característica de uma distribuição de probabilidad $(\beta \beta)$  pode ser expandida em uma série em forma da desigualdade:

$$|\zeta(\beta)| \le 1 - \beta^2/2 + |\beta|^3 \cdot \rho/6$$
 se  $\beta^2/2 \le 1$  (H.1)

O limite de integração  $\theta$  é escolhido para balancear a contribuição dos 2 da Equação (H.2). Sendo escolhido  $\theta = \frac{4\sqrt{n}}{3\rho}$ . Como  $E[|Z^2|]^{3/2} \le E[|Z|^3]$  dada pela Desigualdade de

Jensen,  $\rho > 1$  e  $\theta \leq \frac{4\sqrt{n}}{3} < \sqrt{2n}$  . De forma que o teorema é trivialmente verdade para n < 10.

$$\left| H(x) - G(x) \right| \le \frac{1}{\pi} \int_{-\theta}^{\theta} \frac{\left| \xi(\beta) - \xi(\beta) \right|}{|\beta|} \cdot d\beta + 24 \frac{\max(|G'|)}{(\pi\theta)} \tag{H.2}$$

onde H(x) é a função distribuição acumulada com esperança nula no intervalo [0, 1] e função característica  $\zeta$ ; e G(x) é uma função diferenciável com certas propriedades;  $\xi$  é a transformada de Fourier da função G(x) e tem derivada  $\xi$ ' tal que  $\xi$ '(0) = 0. Usando o Teorema da Curva Suave:

$$\pi |F_{Z} - \Phi| \le \int_{-\theta}^{\theta} \frac{\left| \varsigma^{n} \left( \beta / \sqrt{n} \right) - \exp\left( -\beta^{2} / 2 \right) \right|}{|\beta|} \cdot d\beta + 24 \frac{\max(|\phi|)}{(\theta)} \tag{H.3}$$

onde  $F_Z$  é uma função de distribuição acumulada qualquer; $\Phi$  é a função acumulada da distribuição normal e  $\phi$  é a função de distribuição normal propriamente dita.

$$\max(|\phi|) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \le \frac{2}{5}$$
, que corresponde ao limite inferior sobre  $\pi$  de 25/8 = 3,125.

Usando o Lema H.1, sendo *l* um número inteiro e *z* real:

$$\left| \exp(iz) - \sum_{k=0}^{l} \frac{(iz)^{j}}{j!} \right| \le \min\left( \frac{\left| z \right|^{l+1}}{(l+1)!}; \frac{2|z|^{l}}{l!} \right)$$
(H.4)

Então  $|\zeta(\beta) - 1 + \beta^2/2| \le |\beta|^3 \cdot \rho/6$  para  $\forall \beta \in \Im$ , produzindo

$$|\zeta(\beta/\sqrt{n}) - 1 - \beta^2/(2n)| \le |\beta|^3 \cdot \rho \cdot n^{-3/2}/6 \text{ e } |\zeta(\beta/\sqrt{n}) - 1)| \le 1 - \beta^2/(2n) + |\beta|^3 \cdot \rho \cdot n^{-3/2}/6 \text{ se}$$
  
 $|\beta| \le \theta$ 

Portanto:

$$|\zeta(\beta/\sqrt{n})| \le 1 - \beta^2/(2n)| - |\beta|^2 \cdot 4/(3 \times 6n) = 1 - 5/(18 n) \beta^2 \le \exp((-5/18 n) \beta^2)$$

$$|\zeta(\beta/\sqrt{n})|^{n-1} = \exp((-5(n-1)/18 n) \beta^2) \text{ se } n \ge 10$$

$$|\zeta(\beta/\sqrt{n})|^{n-1} \le \exp(-\beta^2/4)$$

Sendo  $\alpha$  e  $\nu$  números complexos, tal que  $|\alpha| \ge |\nu|$ 

$$|\alpha^{n} - v^{n}| = |\alpha - v| \cdot \left| \sum_{j=0}^{n-1} \alpha^{j} v^{n-1-j} \right| \le |\alpha - v| \sum_{j=0}^{n-1} |\alpha^{j}| |v^{n-1-j}| = |\alpha - v| n \cdot |\alpha|^{n-1}$$
(H.5)

Portanto o integrando da equação D.3 é limitado por

$$\left| \varsigma^{n} \left( \beta / \sqrt{n} \right) - \exp \left( -\beta^{2} / 2n \right) \exp \left( -\beta^{2} / 4 \right) n \left| \beta \right|^{-1} e,$$

$$\left| \varsigma \left( \beta / \sqrt{n} \right) - \exp \left( -\beta^{2} / 2n \right) \right| \leq \left| \varsigma \left( \beta / \sqrt{n} \right) - 1 + \beta^{2} / (2n) \right| + \left| 1 - \beta^{2} / (2n) - \exp \left( -\beta^{2} / (2n) \right) \right|$$

$$\leq \left| \beta \right|^{3} \frac{\rho}{6\sqrt{n}} + \frac{\left| \beta \right|^{4}}{8n}$$

Então o integrando da Equação (H.3) pode ser limitado por:

$$n \left( \frac{|\beta|^{2} \rho}{6\sqrt{n}} + \frac{|\beta|^{3}}{8n} \right) \exp(-\beta^{2}/4) \frac{(4/3\sqrt{n})}{\theta} \le \left( \frac{2}{9} \beta^{2} + \frac{1}{18} |\beta|^{3} \right) \frac{\exp(-\beta^{2}/4)}{\theta}$$

Esta expressão pode ser integrada usando por partes no intervalo  $(-\theta, \theta)$ :

$$\pi |F_Z - \Phi| \le \frac{8}{9} \sqrt{\pi} + \frac{8}{9} + 10 < 4\pi$$

O teorema é válido com C = 3. A constante C originalmente foi colocada como 7,59 por Esseen. Posteriormente trabalhos posteriores, provaram que valores 2,9 e 2,05 são também válidos. É requerido que C ser válida para todas as distribuições F e todos os tamanhos de amostra n. Se a uniformidade é requerida apenas para todos F tal que  $n \to \infty$ , então C pode ser trocado por um valor menor. Beek mostrou que C = 0.7975 atende estas critérios mais frouxos.

Lema H.1: Para qualquer número real y, é válido:

$$\left| \exp(iy) - \sum_{k=0}^{l} \frac{(iy)^{k}}{k!} \right| \le \min \left( \frac{|y|^{l+1}}{(l+1)!}; \frac{2|y|^{l}}{l!} \right)$$

Prova: A Integração por partes mostra que:

$$\int_0^x (y-s)^j \exp(is) ds = \frac{y^{j+1}}{j+1} + \frac{i}{j+1} \int_0^x (y-s)^{j+1} \exp(is) ds$$

Adicionalmente, sabe-se que:

$$\exp(iy) = 1 + i \int_0^y \exp(is) ds$$

Substituindo, chegamos a:

$$\exp(iy) = \sum_{k=0}^{j} \frac{(iy)^k}{k!} + \frac{i^{j+1}}{j!} \int_0^y (y-s)^j \exp(is) ds$$

Note que: 
$$\left| \int_0^y (y-s)^j \exp(is) ds \right| \le |y|^{j+1}$$

Integrando por partes:

$$\int_0^y (y-s)^j \exp(is) ds = -iy^j + ij \int_0^y (y-s)^{j-1} \exp(is) ds = ij \int_0^y (y-s)^{j-1} (\exp(is) - 1) ds$$

e também:

$$\left| \int_0^y (y - s)^j \exp(is) ds \right| \le 2j |y|^j$$

# ANEXO I: TABELA SOBRE DIMENSÕES PADRÕES E PROPRIEDADES DE TUBOS (LUDWIG, 1999).

Diâmetr	D:2		Espessu-	D::::	Massa	Diâme-	Diâme-		Espessu-	Diâme-	Massa
0	Diâmetro	Desig-	ra da	Diâmetro	de aço	tro	tro	Desig-	ra da	tro	de aço
nominal	Externo	nação	parede	Interno (pol)	do tubo	nominal	Externo	nação	parede	Interno	do tubo
(pol)	(pol)		(pol)	_	(lb/ft)	(pol)	(pol)		(pol)	(pol)	(lb/ft)
16	16,000	10 Ga.	0,134	15,732		20	20,000	10 Ga.	0,134	19,732	28
16	16,000	8 Ga.	0,164	15,672	28	20	20,000	8 Ga.	0,164	19,672	35
16	16,000		0,188	15,624	32	20	20,000	6 Ga.	0,194	19,612	41
16	16,000	6 Ga.	0,194	15,612		20	20,000	3 Ga.	0,239	19,522	50
16	16,000	API	0,219	15,562	37	20	20,000	10	0,250	19,500	53
16	16,000	3 Ga.	0,239	15,522	40	20	20,000	API	0,281	19,438	59
16	16,000	10	0,250	15,500	42	20	20,000	API	0,312	19,374	66
16	16,000	API	0,281	15,438	47	20	20,000	API	0,344	19,312	72
16	16,000	20	0,312	15,375	52	20	20,000	Std.	0,375	19,250	79
16	16,000	API	0,344	15,312	57	20	20,000	API	0,406	19,188	85
16	16,000	Std.	0,375	15,250	63	20	20,000	API	0,438	19,124	92
16	16,000	API	0,438	15,124	73	20	20,000	X-Stg.	0,500	19,000	105
16	16,000	X-Stg.	0,500	15,000	83	20	20,000	40	0,594	18,812	123
16	16,000		0,625	14,750	103	20	20,000		0,625	18,750	129
16	16,000	60	0,656	14,688	108	20	20,000	60	0,812	18,376	167
16	16,000		0,750	14,500	122	20	20,000		0,875	18,250	179
16	16,000	80	0,844	14,312	137	20	20,000		1,000	18,000	203
16	16,000		0,875	14,250	141	20	20,000	80	1,031	17,938	209
16	16,000		1,000	14,000	160	20	20,000		1,125	17,750	227
16	16,000	100	1,031	13,938	165	20	20,000		1,250	17,500	250
16	16,000		1,125	13,750	179	20	20,000	100	1,281	17,438	256
16	16,000	120	1,219	13,562	193	20	20,000		1,375	17,250	274
16	16,000		1,250	13,500	197	20	20,000	120	1,500	17,000	297
16	16,000		1,375	13,250	215	20	20,000	140	1,750	16,500	342
16	16,000	140	1,438	13,124	224	20	20,000	160	1,969	16,062	379
16	16,000		1,500	13,000	232	22	22,000	8 Ga.	0,164	21,672	38
16	16,000	160	1,594	12,812	245	22	22,000	6 Ga.	0,194	21,612	45
18	18,000	10 Ga.	0,134	17,732	26	22	22,000	3 Ga.	0,239	21,522	56
18	18,000	8 Ga.	0,164	17,672	31	22	22,000	API	0,250	21,500	58
18	18,000	6 Ga.	0,194	17,612	37	22	22,000	API	0,281	21,438	65
18	18,000	3 Ga.	0,239	17,522		22	22,000	API	0,312	21,376	
18	18,000	10	0,250	17,500	47	22	22,000	API	0,344	21,312	80
18	18,000	API	0,281	17,438	49	22	22,000	API	0,375	21,250	87
18	18,000	20	0,312	17,375	59	22	22,000	API	0,406	21,188	94
18	18,000	API	0,344	17,312		22	22,000	API	0,438	21,124	101
18	18,000	Std.	0,375	17,250		22	22,000	API	0,500	21,000	115
18	18,000	API	0,406	17,188	76	22	22,000		0,625	20,750	143
18	18,000	30	0,438	17,124		22	22,000		0,750	20,500	170
18	18,000	X-Stg.	0,500	17,000	93	22	22,000		0,875	20,250	198
18	18,000	40	0,562	16,876		22	22,000		1,000	20,000	224
18	18,000		0,625	16,750		22	22,000		1,125	19,750	251
18	18,000	60	0,750	16,500	138	22	22,000		1,250	19,500	277
18	18,000		0,875	16,250	160	22	22,000		1,375	19,250	303
18	18,000	80	0,938	16,124	171	22	22,000		1,500	19,000	329
18	18,000		1,000	16,000	182	24	24,000	8 Ga.	0,164	23,672	42
18	18,000		1,125	15,750		24	24,000	6 Ga.	0,194	23,612	49
18	18,000	100	1,156	15,688	208	24	24,000	3 Ga.	0,239	23,522	61
18	18,000		1,250	15,500	224	24	24,000	10	0,250	23,500	63
18	18,000	120	1,375	15,250	244	24	24,000	API	0,281	23,438	71
18	18,000		1,500	15,000	265	24	24,000	API	0,312	23,376	79
18	18,000	140	1,562	14,876		24	24,000	API	0,344	23,312	87
18	18,000	160	1,781	14,438	309	24	24,000	Std.	0,375	23,250	95

Diâme-	D:^ +		Espessu-	D::::	Massa	Diâme-	Diâme-		Espessu-	Diâme-	Massa
tro	Diâme-tro Externo	Designa	ra da	Diâmetro Interno	de aço	tro	tro	Desig-	ra da	tro	de aço
nominal	(pol)	ção	parede	(pol)		nominal	Externo	nação	parede	Interno	do tubo
(pol)	_	A DY	(pol)		(lb/ft)	(pol)	(pol)	A DY	(pol)	(pol)	(lb/ft)
24	24,000	API	0,406	23,188	102		32,000	API	0,344	31,312	116
24	24,000	API	0,438	23,124	110		32,000	API	0,375	31,250	127
24	24,000	X-Stg.	0,500	23,000	125	32 32	32,000	API	0,406	31,188	137
24	24,000	30	0,562	22,876 22,750	141		32,000	API	0,438	31,124	148
24 24	24,000 24,000	40	0,625 0,688	22,730	156 171	32 32	32,000 32,000	API	0,500 0,625	31,000 30,750	168 209
24	24,000	40 	0,750	22,500	186		32,000		0,023	30,730	250
24	24,000		0,730	22,250	216		32,000		0,730	30,250	291
24	24,000	60	0,969	22,230	238	32	32,000		1,000	29,000	331
24	24,000		1,000	22,000	246	32	32,000		1,125	29,750	371
24	24,000		1,125	21,750	275	32	32,000		1,250	29,500	410
24	24,000	80	1,219	21,562	297		32,000		1,375	29,250	450
24	24,000		1,250	21,500	304		32,000		1,500	29,000	489
24	24,000		1,375	21,250	332	34	34,000	API	0,250	33,500	90
24	24,000		1,500	21,000	361	34	34,000	API	0,281	33,438	101
24	24,000	100	1,531	20,938	367	34	34,000	API	0,312	33,376	112
24	24,000	120	1,812	20,376	429	34	34,000	API	0,344	33,312	124
24	24,000	140	2,062	19,876	484	34	34,000	API	0,375	33,250	135
24	24,000	160	2,344	19,312	542	34	34,000	API	0,406	33,188	146
26	26,000	8 Ga.	0,164	25,672	45	34	34,000	API	0,438	33,124	157
26	26,000	6 Ga.	0,194	25,612	54	34	34,000	API	0,500	33,000	179
26	26,000	3 Ga.	0,239	25,522	66	-	34,000		0,625	32,750	223
26	26,000	API	0,250	25,500	67		34,000		0,750	32,500	266
. 26	26,000	API	0,281	25,438	77		34,000		0,875	32,250	308
26	26,000	API	0,312	25,376	84		34,000		1,000	32,000	353
26	26,000	API	0,344	25,312	94	34	34,000		1,125	31,750	395
26	26,000	API	0,375	25,250	103	34	34,000		1,250	31,500	437
26	26,000	API	0,406	25,188	111	34	34,000		1,375	31,250	479
26	26,000	API	0,438	25,124	120		34,000		1,500	31,000	521
26	26,000	API	0,500	25,000	136		36,000		0,164	35,672	63
26	26,000		0,625	24,750	169	36	36,000		0,194	35,612	74
26	26,000		0,750	24,500	202	36	36,000	A DI	0,239	35,522	91
26	26,000		0,875	24,250	235	36 36	36,000	API	0,250	35,500	96 107
26	26,000		1,000	24,000 23,750	267 299	36	36,000	API API	0,281 0,312	35,438	107 119
26 26	26,000 26,000		1,125 1,375	23,750	362	36 36	36,000 36,000	API	0,312	35,376 35,312	131
26	26,000		1,500	23,230	393		36,000	API	0,344	35,250	143
30	30,000	8 Ga.	0,164	29,672	52		36,000	API	0,373	35,188	154
30	30,000	6 Ga.	0,104	29,612	62		36,000	API	0,438	35,134	166
30	30,000	3 Ga.	0,239	29,522	76		36,000	API	0,500	35,000	190
30	30,000	API	0,250	29,500	79		36,000		0,625	34,750	236
30	30,000	API	0,281	29,438	89		36,000		0,750	34,500	282
30	30,000	10	0,312	29,376	99		36,000		0,875	34,250	329
30	30,000	API	0,344	29,312	109	36	36,000		1,000	34,000	374
30	30,000	API	0,375	29,250	119		36,000		1,125	33,750	419
30	30,000	API	0,406	29,188	130		36,000		1,250	33,500	464
30	30,000	API	0,438	29,124	138		36,000		1,375	33,250	509
30	30,000	20	0,500	29,000	158	36	36,000		1,500	33,000	553
30	30,000	30	0,625	29,750	196		42,000		0,250	41,500	112
30	30,000		0,750	28,500	234	42	42,000		0,375	41,250	167
30	30,000		0,875	28,250	272	42	42,000		0,500	41,000	222
30	30,000		1,000	28,000	310		42,000		0,625	40,750	276
30	30,000		1,125	27,750	347		42,000		0,750	40,500	331
30	30,000		1,250	27,500	384		42,000		0,875	40,250	385
30	30,000		1,375	27,250	421	42	42,000		1,000	40,000	438
30	30,000		1,500	27,000	457	42	42,000		1,125	39,750	492
32	32,000	API	0,250	31,500	85		42,000		1,250	39,500	544
32	32,000	API	0,281	31,438	95		42,000		1,375	39,250	597
32	32,000	API	0,312	31,376	106	42	42,000		1,500	39,000	649

### ANEXO J: EQUAÇÕES PARA ESTIMAÇÃO DE CURVAS CARACTERÍSTICAS DE BOMBAS TRANSCRITAS A PARTIR DE ÁBACOS DE KARASSIK (MATTOS e FALCO, 1998).

#### CÁLCULO DA CURVA DE EFICIÊNCIA n

$x = 1,57470907$ . $ln(N_s) - 10,0786351$	(J.1)

$$\eta_{25\%Q} = 0.528880597 - 3.10571696.10^{-2} x - 3.62797417.10^{-3} x^2$$
(J.2)

$$\eta_{50\%Q} = 0,79601376 - 1,66774379.10^{-2} x - 3,72684991.10^{-3} x^{2} 
\eta_{75\%Q} = 0,952379196 - 4,69382414.10^{-3} x - 2,28525816.10^{-3} x^{2}$$
(J.3)

$$\eta_{110\%O} = 0.996818696 - 1.01174503.10^{-2} x + 9.55599116.10^{-4} x^2$$
(J.5)

#### CÁLCULO DA CURVA DE HEAD H

$$x = 2,30013131. \ln(N_s) - 14,7242087$$
 (J.6)

$$y_1 = 0.128825117 x^2 - 0.202375579 x + 1.91341148$$
 (J.7)

$$y_2 = 0.0838734372 x^2 - 0.0571911166 x + 1.86682106$$

$$y_3 = 0.0575224996 x^2 - 0.0348882954 x + 1.95136571$$
 (J.8)

$$y_4 = 0.03224072 x^2 - 0.0198532 x + 1.85432519$$
 (J.9)

$$y_5 = -5,48244171.10^{-3} x^3 + 3,11338067.10^{-2} x^2 - 8,81662864.10^{-2} x +$$

$$H_{0\%Q} = 0.707628076 H_{BEP} \exp(0.225198683 y_I)$$
(J.11)

$$H_{25\%Q} = 0.707628076 H_{BEP}. \exp(0.225198683 y_2)$$
 (J.12)  
 $H_{50\%Q} = 0.707628076 H_{BEP}. \exp(0.225198683 y_3)$  (J.13)

$$H_{75\%O} = 0.707628076 H_{BEP}. \exp(0.225198683 y_4)$$
 (J.14)

$$H_{II0\%Q} = 0.707628076 H_{BEP}. \exp(0.225198683 y_5)$$
 (J.15)

#### CÁLCULO DA CURVA DE POTÊNCIA PW

$$x = 1,5673185. \ln(N_s) -10,0257112$$
 (J.16)

$$z_1 = 0.0718237758 x^2 + 0.319154985 x + 0.207169739$$
 (J.17)

$$z_2 = 8,21982464.10^{-2} x^2 + 4,97943497.10^{-2} x + 0,870234407$$
 (J.18)

$$z_2 = 8,21982464.10^{-2} x^2 + 4,97943497.10^{-2} x + 0,870234407$$

$$z_3 = 5,00802034.10^{-2} x^2 + 2,83269762.10^{-2} x + 1,28649169$$
(J.18)
(J.19)

$$z_4 = 2,86822093.10^{-2} x^2 - 2,87108382.10^{-3} x + 1,60543068$$
 (J.20)

 $z_5 = 1,94470773 - 5,34863834.10^{-2} x + 2,81764421.10^{-2} x^2 +$ 

$$-7,42550306.10^{-3} x^3 (J.21)$$

$PW_{0\%Q} = 0.300623581 \ PW_{BEP} \cdot \exp(0.649215764 \ z_1)$	(J.22)
$PW_{25\%Q} = 0.300623581 \ PW_{BEP}$ . exp $(0.649215764 \ z_2)$	(J.23)
$PW_{50\%Q} = 0.300623581 \ PW_{BEP}$ . exp $(0.649215764 \ z_3)$	(J.24)
$PW_{75\%Q} = 0.300623581 \ PW_{BEP}$ . exp $(0.649215764 \ z_4)$	(J.25)
$PW_{110\%0} = 0.300623581 \ PW_{BEP}. \ \exp(0.649215764 \ z_5)$	(J.26)

## ANEXO K: EQUAÇÕES PARA CORREÇÃO DE PERFORMANCE DE BOMBAS DEVIDO FLUIDOS VISCOSOS, TRANSCRITAS A PARTIR DO ÁBACO DA HYDRAULIC INSTITUTE (LUDWIG, 1999).

 $Q_w$  Vazão volumétrica na condição de bombeio de água [gpm]

 $Q_{\nu}$  Vazão volumétrica na condição de bombeio de fluido viscoso [gpm]

 $H_w$  Head do primeiro estágio na condição de bombeio de água [ft]

υ viscosidade cinemática [cSt]

$$x = 2,50235163025103 \ln(Q_w) - 11,5328556469413$$
 (J.1)

$$y = 0.627524663 \ln(H_w) - 0.738684178 + 0.485782788135729 x$$
 (J.2)

$$z = 1,24755585 \ln(v) + 2,02479641 - 0,498808930440717 y$$
 (J.3)

#### CÁLCULO DO FATOR DE CORREÇÃO DE EFICIÊNCIA

 $C_E = 1,00359694 - 1,02031634.10^{-2} z - 2,36582203.10^{-3} z^2 - 7,58475757.10^{-4} z^3$  (J.4)

$$\eta_{v} = \frac{\eta_{w}}{C_{E}} \tag{J.5}$$

#### CÁLCULO DO FATOR DE CORREÇÃO DE VAZÃO

 $C_Q = 1,00712205 - 2,78122069.10^{-2}z + 1,39531583.10^{-2}z^2 - 1,7633784.10^{-3}z^3$  (J.6)

SE 
$$C_Q > 1,000$$
 ENTÃO (J.7)  
 $C_Q = 1,000$ 

FIM SE

$$Q_v = C_O \cdot Q_w$$

CÁLCULO DO FATOR DE CORREÇÃO DE HEAD 60%  $Q_{\nu}$ 

Para 
$$z < 1,7500$$
: (J.8)  
 $C_{H60} = 1,0000$  (i)

Para 
$$1,7500 \le z \le 3,4500$$
:

$$C_{H60} = 1,000 - 3,53.10^{-3} (z - 1,750)$$
 (ii)

Para z > 3,4500:

$$C_{H60} = 8,38545899.10^{-1} + 6,94839863.10^{-2} \text{ z} + -8,07094428.10^{-3} \text{ z}^2$$
 (iii)

#### CÁLCULO DO FATOR DE CORREÇÃO DE HEAD 80% $Q_{\nu}$

Para 
$$z < 1,7500$$
: (J.9)  $C_{H80} = 1,0000$  (i)

Para 
$$1,7500 \le z \le 2,7500$$
:  
 $C_{H80} = 1,000 - 6,45.10^{-3} (z - 1,750)$  (ii)

Para z > 2,7500:

$$C_{H80} = 8,82775852.10^{-1} + 5,67607477.10^{-2} z + 7,70071411.10^{-3} z^{2}$$
 (iii)

#### CÁLCULO DO FATOR DE CORREÇÃO DE HEAD 100% $Q_{\nu}$

Para 
$$z < 1,7500$$
: (J.10)  $C_{H100} = 1,0000$ 

Para 
$$1,7500 \le z \le 2,7500$$
:  
 $C_{H100} = 1,000 - 1,29.10^{-2} (z - 1,750)$  (ii)

Para 2,7500 < 
$$z \le 3,4500$$
:  
 $C_{H100} = 1,000 - 9,21.10^{-3} (z - 2,750)$  (iii)

Para z > 3,4500:

$$C_{H100} = 8,92660673.10^{-1} + 5,22996279.10^{-2} z + 7,76692246.10^{-3} z^2$$
 (iv)

#### CÁLCULO DO FATOR DE CORREÇÃO DE HEAD 120% $Q_{\nu}$

Para 
$$z < 1,7500$$
: (J.11)  $C_{H120} = 1,0000$ 

Para 
$$1,7500 \le z \le 2,7500$$
:  
 $C_{H120} = 1,000 - 1,935.10^{-2} (z - 1,750)$  (ii)

Para 
$$2,7500 \le z \le 3,4500$$
:  
 $C_{HI20} = 1,000 - 1,964.10^{-2} (z - 2,750)$  (iii)

Para z > 3,4500:

$$C_{HI20} = 8,73963682.10^{-1} + 5,65206646.10^{-2} z + 8,57464812.10^{-3} z^2$$
 (iv)

$$H_b = C_{Hb} \cdot H_{BEP} \tag{J.12}$$