



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM
ENGENHARIA QUÍMICA



Otimização do Scheduling de Nafta Petroquímica utilizando Algoritmos Genéticos

Autor: Bruna Magnani Rodrigues

Orientador: Marcelo Farenzena

Porto Alegre, julho de 19

Sumário

Sumário	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Lista de Figuras	v
Lista de Tabelas	vii
Lista de Símbolos	viii
Lista de Abreviaturas e Siglas	x
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	3
2.1 Sistema Integrado de Otimização de Processo	3
2.2 Otimização Aplicada ao <i>Planning</i> e ao <i>Scheduling</i>	4
2.3 Otimização do <i>Scheduling</i> na Indústria do Refino e na Petroquímica	6
2.3.1 <i>Scheduling</i> de Petróleo	6
2.3.2 <i>Scheduling</i> de Nafta	7
2.4 Métodos de Resolução de Problemas de Otimização de <i>Scheduling</i>	9
3 Metodologia e Caso de Estudo	11
3.1 Caso de Estudo	11
3.1.1 Estratégia de <i>Blending</i>	13
3.2 Metodologia	15
3.2.1 Equacionamento do Problema	15
3.2.2 Algoritmos Genéticos	19
3.2.3 Descrição do Algoritmo Implementado	20
4 Resultados e Discussões	24
4.1 Codificação do Algoritmo Genético	24
4.2 Testes para inclusão das restrições	24
4.2.1 Cenário I: Algoritmo Base	24
4.2.2 Cenário II: Inclusão da restrição de recebimento e expedição simultâneos	25
4.2.3 Cenário III: Inclusão das restrições de processamento de contaminantes	27
4.2.4 Cenário IV: Inclusão das restrições de tamanho mínimo de cota	29
4.3 Avaliação do modelo final obtido para diferentes cenários de programação	30
4.3.1 Cenário I: <i>Blending</i> de parafinicidade	31
4.3.2 Cenário II: <i>Blending</i> de parafinicidade e X1	31
4.3.3 Cenário III: <i>Blending</i> de parafinicidade, X1 e X2	33
4.4 Comparação da resposta do modelo com uma programação real	34
5 Conclusões e Trabalhos Futuros	35
Referências	36
APÊNDICE A – Gráficos das simulações da seção 4.2	41
APÊNDICE B – Informações dos navios das simulações da seção 4.3	44

Agradecimentos

Aos meus pais, Adair e Suzana, por todos os ensinamentos que a mim foram passados, todas as oportunidades que a mim foram dadas e por todo o incentivo e o suporte que recebo diariamente para a realização dos meus sonhos.

À minha irmã, Bárbara, pela paciência e atenção em todos os momentos que precisei, pela parceria e por me inspirar a ser uma pessoa cada vez melhor.

Ao meu namorado, Luis Augusto, pela compreensão e pelo apoio diante das minhas escolhas, por estar do meu lado em todos os momentos e por sempre me incentivar.

Aos meus familiares e amigos, pela compreensão nos momentos de ausência e pelo apoio e incentivo incessantes.

Ao meu orientador, Marcelo, por todos os ensinamentos e conselhos recebidos, pela disponibilidade e interesse em colaborar com o meu trabalho e pela ótima atuação como professor da Engenharia Química da UFRGS.

Aos meus líderes, Fábio e Israel, pela oportunidade de realizar meu estágio curricular na área de Matérias-Primas Operações da Braskem, pela confiança depositada e pelas responsabilidades atribuídas a mim, as quais contribuíram para o meu desenvolvimento pessoal e profissional.

Aos membros da banca, Pedro e Eduardo, pelo interesse e disponibilidade para participar da avaliação do meu trabalho de conclusão de curso.

Resumo

Atualmente, as indústrias petroquímicas enfrentam um aumento nos preços da nafta, matéria-prima para a primeira geração, o que torna necessária a busca por novos fornecedores e, muitas vezes, a compra de lotes que apresentam preços mais baixos em função da presença de contaminantes. O gerenciamento otimizado dos lotes recebidos através de operações de *blending* viabiliza o recebimento dos lotes que apresentam contaminantes e o enquadramento destes nos limites de processamento das unidades. Desta forma, técnicas de otimização aplicadas ao *blending* e ao *scheduling* dos recebimentos podem fornecer ferramentas que ajudem a flexibilizar a compra de matérias-primas, diminuindo os gastos com este insumo e aumentando o lucro da empresa.

O objetivo principal deste estudo é a solução do problema de recebimento de matéria-prima de uma indústria petroquímica de primeira geração via otimização matemática, visando auxiliar no processo de tomada de decisões. Como resultado, tem-se a definição das quantidades das matérias-primas disponíveis que irão compor a mistura final que será entregue para processamento nas unidades. O modelo leva em consideração os estoques de nafta disponíveis e a suas respectivas composições no instante inicial da otimização, a disponibilidade de navios para descarregamento, as demandas de consumo das unidades, as restrições operacionais de bombeamento e armazenagem e as restrições de qualidade. Estas últimas englobam os limites de processamento de contaminantes e o percentual mínimo de parafinidade, principal parâmetro de rendimento da nafta, que serve como parâmetro para definir a mistura ideal dos componentes de modo a maximizar o seu rendimento em produtos finais desejados para cada cenário de produção.

O modelo de otimização foi desenvolvido baseado em programação mista inteira não-linear (MINLP), com representação discreta do tempo. As variáveis de decisão envolvem a alocação de descarga de navios em tanques de armazenagem, bem como operações de transferência entre tanques de diferentes parques de tancagem através de oleodutos. Sendo assim, para fins de modelagem, as variáveis de decisão do problema foram descritas como o *status* de abertura e fechamento das válvulas de entrada e saída de cada tanque do sistema, as quais totalizam 34 válvulas, para cada um dos instantes da simulação, os quais totalizam 56, obtendo-se assim um total de 1.904 variáveis de decisão. Foram consideradas restrições operacionais relacionadas a volumes de produto nos tanques, *status* de abertura e fechamento das válvulas dos tanques e trocas excessivas de tanques de recebimento/expedição, assim como restrições de qualidade relacionadas aos limites de processamento de contaminantes das unidades.

Para a resolução do problema de otimização, foi empregado um algoritmo genético e adotado um horizonte de predição de tamanho igual a 56. O modelo proposto foi aplicado ao sistema de recebimento de matéria-prima de uma indústria petroquímica real e os resultados mostram o desempenho do modelo quando aplicado a cenários distintos, envolvendo diferentes graus de dificuldade. A partir dos resultados obtidos e do seu comparativo com uma programação realizada por um especialista *ad hoc* através da Tabela 2, evidenciou-se que o algoritmo foi capaz de resolver cada um dos cenários avaliados, sempre mostrando aderência à estratégia de *blending* adotada pela indústria.

Lista de Figuras

Figura 1: Os cinco níveis de um sistema integrado de otimização de processos: (1) Planejamento, (2) Programação, (3) Gerenciamento e Otimização da Fábrica, (4) Gerenciamento e Controle das Unidades e (5) Monitoramento, Análise e Controle de Processos.....	4
Figura 2: Sistema logístico típico de recebimento de matéria-prima de uma indústria petroquímica de primeira geração. Extraído de LEE et al. (2010).....	8
Figura 3: Diagrama esquemático do sistema de recebimento de nafta petroquímica da unidade Q2.	12
Figura 4: Vetor binário de tamanho 1 x (34 x HP) que representa um indivíduo da população de possíveis soluções.....	21
Figura 5: Representação do vetor indivíduo no formato dos subconjuntos de válvulas definidos na seção 3.2.1.	23
Figura 6: Operador genético de <i>crossover</i> implementado neste trabalho.	23
Figura 7: Operador genético de mutação implementado neste trabalho.	23
Figura 8: Evolução da aptidão do melhor indivíduo da população ao longo das gerações.24	
Figura 9: Parafinicidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação com o algoritmo base.....	25
Figura 10: Volume dos tanques dos sistemas 1, 2 e 3 ao longo da simulação com o algoritmo base.....	26
Figura 11: Conflito de recebimento versus expedição para os tanques dos sistemas 1,2 e 3 a cada instante da simulação com o algoritmo base.	26
Figura 12: Conflito de recebimento versus expedição para os tanques dos sistemas 1,2 e 3 a cada instante da simulação após a inclusão da premissa V.	28
Figura 13: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação.	29
Figura 14: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação.	29
Figura 16: Trocas de tanque receptor/expedidor nos sistemas 1, 2 e 3 após a inclusão da premissa VII.	31
Figura 17: Parafinicidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário I..	32
Figura 18: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário I.	32
Figura 19: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário I.	32
Figura 20: Parafinicidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário II. 32	
Figura 21: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário II.	33
Figura 22: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário II.	33
Figura 23: Parafinicidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário III.	33

Figura 24: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário III.	34
Figura 25: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário III.	34

Lista de Tabelas

Tabela 1: Parâmetros de entrada necessários para a simulação	23
Tabela 2: Composição média da nafta entregue nos tanques do sistema 3 ao longo do horizonte de programação	34

Lista de Símbolos

HP	Horizonte de previsão
i	Instante de tempo da simulação
j	Índice do tanque
$V_{i,j}$	Volume do tanque j no intervalo de tempo i
$P_{i,j}$	Parafinicidade do tanque j no intervalo de tempo i
$X_{1,i,j}$	Concentração de X1 no tanque j no intervalo de tempo i
$X_{2,i,j}$	Concentração de X2 no tanque j no intervalo de tempo i
Q_k	Quantidade de nafta do navio k
$P_{0,k}$	Parafinicidade do navio k a ser descarregado
$X_{1,0,k}$	Concentração de X1 do navio k a ser descarregado
$X_{2,0,k}$	Concentração de X2 do navio k a ser descarregado
$V_{\min,j}$	Volume operacional mínimo do tanque j
$V_{\max,j}$	Volume operacional máximo do tanque j
l_0	Inventário do duto 0
l_1	Inventário do duto 1
l_2	Inventário do duto 2
l_3	Inventário do duto 3
l_4	Inventário do duto 4
F_0	Vazão de operação do duto 0
F_1	Vazão de operação do duto 1
F_2	Vazão de operação do duto 2
F_3	Vazão de operação do duto 3
F_4	Vazão de operação do duto 4
$z_{i,j}^E$	Status de abertura da válvula de entrada do tanque j no intervalo de tempo i
$z_{i,j}^S$	Status de abertura da válvula de saída do tanque j no intervalo de tempo i
FO	Função objetivo do problema de otimização
P_{SP}	<i>Setpoint</i> de parafinicidade

Δt	Intervalo de tempo
BMG	Balanço de massa global
BMC	Balanço de massa por componente
$X1_{\max}$	Limite máximo de concentração de X1
$X2_{\max}$	Limite máximo de concentração de X2
P_{\min}	Limite mínimo de parafinicidade
TQ	Termo referente às penalidades para trocas excessivas de tanques

Lista de Abreviaturas e Siglas

MIP	Programação Inteira Mista
MILP	Programação Linear Inteira Mista
MINLP	Programação Não-Linear Inteira Mista
AG	Algoritmo Genético
Q2	Unidade de Químicos 2 da Braskem
RS	Rio Grande do Sul
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Dióxido de carbono
OMS	Sulfeto de dimetil
DMDS	Dissulfeto de dimetil
NaCl	Cloreto de Sódio
MeOH	Metanol
HCl	Ácido clorídrico

1 Introdução

Com o surgimento da mentalidade de melhoria contínua de processos, evidenciou-se um crescimento na utilização da otimização matemática nas grandes empresas. O objetivo da sua aplicação, na maioria dos casos, é a minimização de custos e a consequente maximização de lucros em todos os níveis dentro da companhia. Para as principais áreas que têm interface com o processo produtivo, a otimização pode se dar, por exemplo, visando a minimização dos custos energéticos, dos custos com insumos e matéria-prima, e a redução das perdas de processo.

No caso de uma indústria petroquímica de primeira geração, mais de 55% dos custos de produção estão associados ao custo da matéria-prima (LEE et al., 2010). Sendo assim, a aplicação da otimização em processos que envolvam decisões relacionadas à matéria-prima tem grande potencial de agregação de valor para a companhia. Pequenas melhorias feitas nestes processos decisórios podem gerar, por exemplo, reduções de custos significativas na compra da matéria-prima ou, ainda, ganhos de produção resultantes da aplicação de estratégias de *blending* otimizadas para a qualidade da matéria-prima entregue às unidades de processamento de nafta.

Em termos da qualidade da matéria-prima requerida para processamento nas plantas da primeira geração, pode-se afirmar que ela apresenta uma grande variação ao longo dos meses. Essa variação deve-se a oscilações de mercado que resultam em diferentes valorações, ao longo do tempo, para os produtos finais deste processo produtivo. Há cenários em que é mais rentável processar matérias-primas leves, visando a produção majoritária de gases, como eteno, propeno e butadieno, e, em outros casos, é mais rentável processar matérias-primas pesadas, visando a produção majoritária de líquidos, como benzeno, tolueno e xilenos. Estes cenários de operação se estabelecem devido à variação da margem de venda de cada produto e implicam demandas variáveis de qualidade da matéria-prima, cujo intuito é tentar absorver as oscilações de mercado e maximizar os lucros da empresa.

Além da garantia de qualidade da matéria-prima, a otimização do *scheduling* também deve ter como objetivo promover o abastecimento ideal em termos de volume de nafta, garantindo a autonomia das unidades. Assim, a fim de mitigar o risco de desabastecimento ou, ainda, evitar a exposição das unidades ao processamento de matérias-primas fora de especificação, faz-se necessária a realização de uma programação otimizada em função de dois parâmetros globais: o *scheduling* e o *blending* da matéria-prima. Com relação ao primeiro parâmetro, a otimização da programação deve ter como objetivo promover a máxima transferência de matéria-prima ao longo do sistema, respeitando as restrições operacionais do sistema, e, com relação ao segundo, promover o completo atendimento das especificações de qualidade da nafta, respeitando as restrições de limite de processamento de contaminantes de cada unidade.

Dessa forma, por meio deste trabalho, objetiva-se construir uma ferramenta para a programação de recebimento de matéria-prima que seja capaz de otimizar variáveis do *scheduling* e do *blending* de nafta simultaneamente. Para viabilizar o teste da ferramenta desenvolvida, utilizou-se como caso de estudo o sistema de recebimento de matéria-prima de uma indústria petroquímica de primeira geração, o qual compreende operações de descarga de navios de nafta, parques de tancagem e sistemas de oleodutos para recebimento, armazenagem e movimentação de matérias-primas, respectivamente.

A aplicação desta ferramenta tem potencial para melhorar o resultado econômico da empresa de duas formas. Primeiramente, através do fornecimento contínuo do perfil de matéria-prima adequado aos cenários de produção em termos de rendimento, com o auxílio de uma ação integrada das equipes de responsáveis pelo planejamento da produção e pela programação de matérias-primas, gerando assim maior receita para a companhia. Em segundo lugar, através da viabilização do recebimento de matérias-primas mais competitivas, as quais apresentam um menor preço de compra, porém uma pior qualidade em termos de contaminantes. Ambas as formas de obtenção de melhores resultados para a companhia são resultantes da capacidade de se poder considerar múltiplos parâmetros de forma simultânea no cálculo do *blending* ideal, o que é viabilizado pela utilização de uma ferramenta de otimização, em vez de modelos simples de simulação.

Além dos potenciais ganhos econômicos da utilização da ferramenta, pode-se considerar também um ganho considerável em produtividade para a equipe responsável pela programação de matérias-primas. Isso se dá uma vez que a sua implementação permite um aumento no número de parâmetros possíveis de serem considerados no cálculo das operações de mistura e, ao mesmo tempo, uma redução no tempo utilizado para a simulação da programação a ser realizada. Esta melhoria é evidenciada pois, atualmente, a programação das operações de *blending* e do *scheduling* de recebimento de nafta é realizada através de uma simulação não-otimizada feita pelo responsável pela programação em planilha do *Microsoft Excel*. Este método de confecção da programação é capaz de considerar apenas poucos parâmetros no cálculo de diluição, uma vez que depende de tentativa e erro para a obtenção de uma solução possível para o problema, não sendo necessariamente a solução ótima.

Para atingir o objetivo geral, os seguintes objetivos específicos devem ser atendidos:

1. Levantamento das variáveis e restrições, operacionais e de qualidade, envolvidas no *scheduling* de recebimento e nas operações de *blending* da matéria-prima;
2. Desenvolvimento de um algoritmo genético para a otimização do sistema estudado, tendo como função objetivo os parâmetros de rendimento da matéria-prima, considerando apenas parte das restrições existentes no problema;
3. Inclusão das demais restrições operacionais e de qualidade do problema em questão no algoritmo desenvolvido;
4. Avaliação das respostas do modelo através da realização de otimizações de diferentes cenários e comparação com a programação não-otimizada realizada.

No presente trabalho, o conteúdo é apresentado da seguinte forma: no capítulo 2, uma revisão dos conceitos pertinentes ao tema, como os níveis de otimização existentes em um sistema integrado de otimização de processos, a otimização aplicada aos níveis de *planning* e *scheduling*, a aplicação da otimização a esses níveis nas indústrias do petróleo e petroquímica, e os métodos de resolução de problemas de otimização de *scheduling*; no capítulo 3, a descrição do estudo de caso escolhido e da metodologia utilizada para a solução do problema de otimização; e, no capítulo 4, uma discussão acerca do modelo final proposto e dos resultados obtidos a partir dele para os diferentes testes realizados.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Sistema Integrado de Otimização de Processo

O uso da otimização de processos tem se tornado cada vez mais comum nas grandes empresas na forma de Sistemas Integrados de Otimização. Especialmente nas indústrias de processo contínuo, ela deve ser exercida no escopo de toda a cadeia de suprimentos da empresa, desde o estágio de compra de matéria-prima até o estágio de distribuição do produto, considerando múltiplos objetivos, mesmo que alguns deles sejam conflitantes (ZHOU; CHENG; HUA, 2000). A sua aplicação neste contexto inclui o planejamento e a programação, o gerenciamento de toda a fábrica, o gerenciamento de unidades e a aquisição e o monitoramento de dados. Conforme posto por EDGAR; HIMMELBLAU; LASDON (2001), a otimização e a modelagem são as ferramentas-chave capazes de vincular os componentes de cada uma destas partes da hierarquia de produção.

A Figura 1 esquematiza os níveis de otimização presentes em um sistema integrado de otimização de processo e a hierarquia existente entre eles. Pode-se considerar a existência de 5 principais níveis dentro de uma indústria: (1) Planejamento, (2) Programação, (3) Gerenciamento e Otimização da Fábrica, (4) Gerenciamento e Controle das Unidades e (5) Monitoramento, Análise e Controle de Processos. O intervalo de tempo para a tomada de decisão pode variar da ordem de meses, como ocorre no nível mais alto (planejamento), para a ordem de frações de segundo, como ocorre nos níveis mais baixos (monitoramento de processos, por exemplo). A comunicação ocorre de forma ideal quando é bidirecional entre os níveis. Dessa forma, as metas para os níveis mais baixos são definidas pelos níveis mais altos e as restrições e informações de desempenho são reportadas pelos níveis mais baixos aos níveis mais altos (EDGAR; HIMMELBLAU; LASDON, 2001).

Dentre os níveis de otimização existentes, o planejamento está associado a classes amplas de produtos e à determinação da capacidade de produção adequada, enquanto a programação tem como foco os detalhes do fluxo de material (matérias-primas e produtos finais), produção, mas também pode estar envolvido com o planejamento *offline*. Devido à integração complexa destes níveis de decisão, a simples otimização de unidades de produção não garante a otimização econômica global de uma indústria (JOLY; MORO; PINTO, 2002). Faz-se necessária, então, a otimização integrada das áreas envolvidas com compra de matéria-prima, com o planejamento da produção, com a comercialização de produtos finais, entre outras, para que se garanta a maximização dos resultados econômicos da empresa como um todo.

Trabalhando nesta linha, PUROHIT; SURYAWANSHI (2013) propõem um método para integração em tempo real da otimização do *blending* de produtos finais de uma refinaria e das unidades de processo secundárias, de forma a melhorar a margem de lucro da refinaria. Já NIE et al. (2015) destacam a importância da integração *online* da programação e do controle da produção e introduzem uma formulação de tempo discreto para a otimização simultânea de decisões de programação e de operação. E, de forma geral, VELEZ; MARAVELIAS (2014) propõem a integração do *scheduling* com o planejamento de médio prazo como uma estratégia importante quando a economia é governada por decisões de planejamento (por exemplo, quando há flexibilidade para produzir produtos diferentes e em diferentes níveis), mas a capacidade e o custo para atingir metas de produção específicas dependem de decisões de programação.

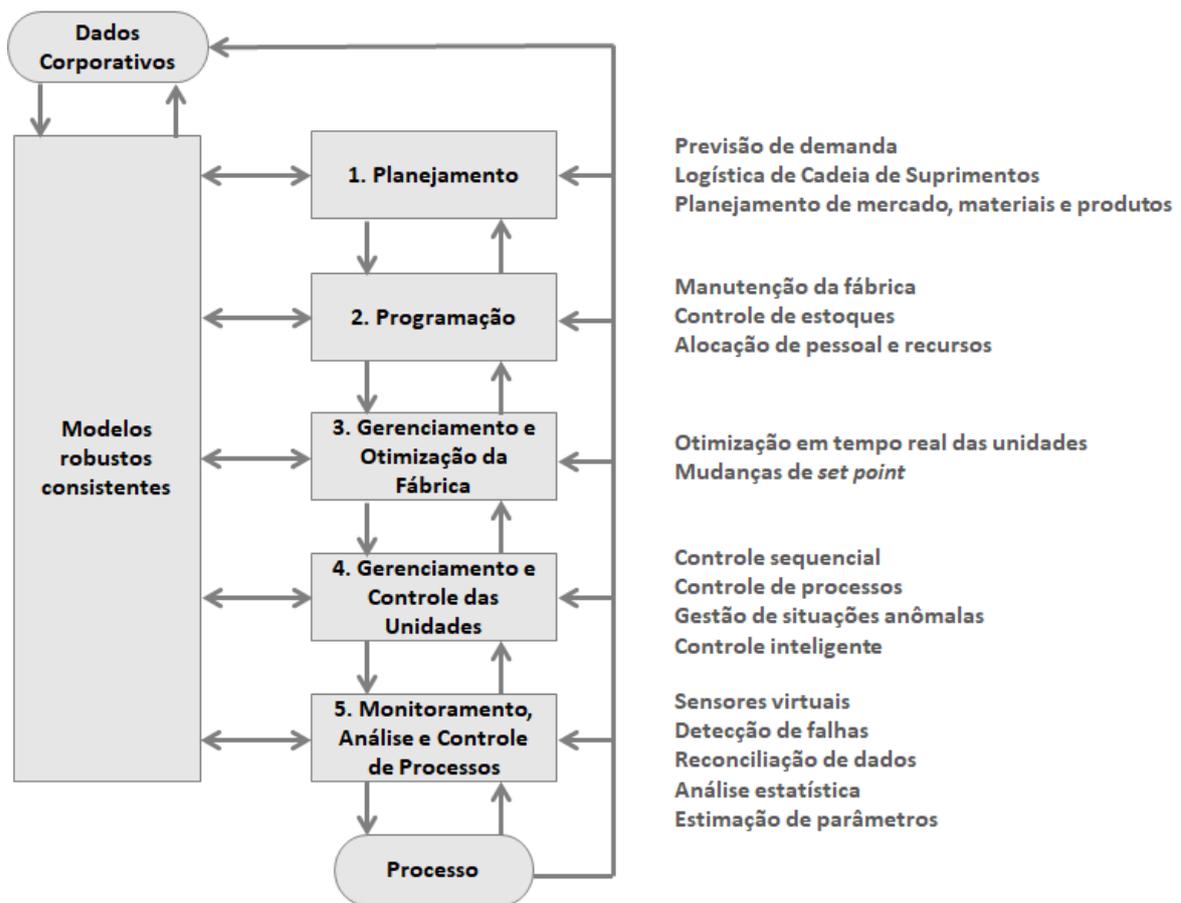


Figura 1: Os cinco níveis de um sistema integrado de otimização de processos: (1) Planejamento, (2) Programação, (3) Gerenciamento e Otimização da Fábrica, (4) Gerenciamento e Controle das Unidades e (5) Monitoramento, Análise e Controle de Processos. Adaptada de EDGAR; HIMMELBLAU; LASDON (2001).

2.2 Otimização Aplicada ao *Planning* e ao *Scheduling*

Dentre as atividades importantes a serem revistas para a implementação desta nova forma de trabalho estão as operações de transporte, que são geralmente consideradas um dos principais gargalos da cadeia produtiva (MÁS; PINTO, 2003). Embora os atrasos impliquem perda de tempo e falta de recursos, as entregas antes dos prazos podem causar excesso de estoques. Ambos os cenários resultam em gastos desnecessários e, portanto, justificam a importância de toda empresa buscar cronogramas de transporte eficientes dentro do seu planejamento operacional.

Pontos focais deste planejamento operacional são o *planning* e o *scheduling*, os quais são definidos por VERDERAME et al. (2010) como atividades inter-relacionadas que têm como objetivo lidar com o gerenciamento de sistemas. O *planning*, ou planejamento, determina os volumes de diferentes matérias-primas a serem processadas e as quantidades de produtos a serem produzidos ao longo de vários meses. Já o *scheduling*, ou programação, lida com os tempos e movimentos das operações da fábrica para realizar o que foi determinado como plano de produção pelas áreas da empresa responsáveis pelo planejamento (REDDY; KARIMI; SRINIVASAN, 2004). Estes movimentos podem englobar, por exemplo, o recebimento da matéria-prima, as operações das unidades da planta e a logística de saída de produtos finais.

Em vez de utilizar heurísticas para determinar as decisões gerenciais apropriadas para o planejamento e a programação em grandes empresas, modelos matemáticos que retratam com precisão os sistemas podem ser utilizados, visando a determinação eficiente e rigorosa da solução ótima. Para problemas de planejamento, a maioria das ferramentas computacionais tem sido baseada em sucessivos modelos de programação linear, como os *softwares* RPMS (HONEYWELL PROCESS SOLUTIONS) e PIMS (ASPEN TECHNOLOGY). Por outro lado, os problemas de programação têm sido tratados por meio de abordagens matemáticas lineares e não-lineares, que utilizam variáveis binárias (códigos MILP e MINLP) para modelar explicitamente as decisões discretas a serem tomadas, como nos trabalhos de LEE; MARAVELIAS (2017) e VELEZ; DONG; MARAVELIAS (2017).

No caso da programação de dutos, modelos de *scheduling* de curto prazo devem levar em conta características mais detalhadas do sistema do que modelos de planejamento. Entre elas, estão as capacidades volumétricas de segmentos de dutos, as variações de vazão e as capacidades das bombas de recalque, por exemplo (REJOWSKI; PINTO, 2008). Problemas de programação de curto prazo foram majoritariamente estudados para plantas de batelada, conforme pode ser encontrado em CHEN et al. (2002), KALLRATH (2003) e FLOUDAS; LIN (2004). Para plantas de processos contínuos, é bem menor o número de trabalhos que pode ser encontrado, entre os quais estão SHAIK et al. (2009), CASTRO; HARJUNKOSKI; GROSSMANN (2009) e HARJUNKOSKI et al. (2014).

A representação do tempo é um dos atributos mais importantes das abordagens para modelos de otimização, devido ao fato de determinar muitos aspectos, incluindo flexibilidade de modelagem e tamanho e tipos de restrições (MARAVELIAS, 2012). Em problemas de *scheduling*, é comum a representação de tempo de forma discreta, a qual assume que as decisões tomadas em um sistema de produção são feitas nos limites dos intervalos de tempo. A duração desse intervalo é determinada tomando-se como base o menor fator comum entre os tempos de processamento envolvidos no problema (MARAVELIAS; GROSSMANN, 2003). Esta forma de representação, escolhida pelos autores LEE; MARAVELIAS (2017), LEE et al. (2010), MERCHAN; LEE; MARAVELIAS (2016), RISBECK et al. (2019) e VELEZ; DONG; MARAVELIAS (2017), divide o horizonte de tempo em parcelas de duração igual e fixa, enquanto a representação contínua do tempo relaxa tal pressuposto, conforme trabalhado por CASTILLO-CASTILLO; CASTRO; MAHALEC (2017), CASTILLO-CASTILLO; MAHALEC (2016), CASTRO; HARJUNKOSKI; GROSSMANN (2009), REJOWSKI; PINTO (2008) e SHAIK et al. (2009).

A abordagem discreta é mais simples de ser aplicada, uma vez que as relações entre os intervalos de tempo adjacentes são dadas pelas equações de balanço de massa e os instantes de tempo exatos das mudanças definem as tomadas de decisão. Entretanto, para algumas classes de problemas, este tipo de formulação pode implicar falhas. Isto ocorre porque, em muitos casos, tamanhos de intervalo de discretização relativamente grandes são utilizados, resultando em erros de aproximação nos dados do problema convertidos, o que pode levar à obtenção de soluções inferiores (LEE; MARAVELIAS, 2018a). De forma a abordar este desafio, pesquisadores desenvolveram uma ampla gama de modelos baseados em uma representação contínua do tempo, sendo essa a representação encontrada na grande maioria dos trabalhos publicados até hoje. Além disso, modelos baseados em uma representação de tempo misto (MARAVELIAS, 2005; WESTERLUND et al., 2007), bem como múltiplas redes de tempo discreto não-uniformes (VELEZ; MARAVELIAS, 2013, 2015) também foram propostos como alternativas às limitações da formulação discreta.

Além de desenvolver uma grande variedade de modelos para o problema de *scheduling*, os trabalhos encontrados na literatura também se dedicaram ao desenvolvimento de métodos aproximados para a solução destes problemas, tais como: algoritmos baseados em heurísticas (por exemplo, regras de despacho); metaheurísticas (por exemplo, evolução genética, algoritmos de enxame de partículas); métodos exatos (como programação matemática e programação de restrições); e, ainda, diferentes tipos de abordagens híbridas e de decomposição (LEE; MARAVELIAS, 2018b). Dentre elas, as baseadas em programação matemática têm sido as mais proeminentes (HARJUNKOSKI et al., 2014; MÉNDEZ et al., 2006), sendo que, dos métodos exatos estudados, a grande maioria é baseada em programação matemática, sendo a maior parte na forma de modelos de Programação Mista Inteira (MIP).

2.3 Otimização do *Scheduling* na Indústria do Refino e na Petroquímica

2.3.1 *Scheduling de Petróleo*

Na literatura, os modelos de otimização lidam com o planejamento e a programação de vários subsistemas da cadeia de suprimento de petróleo, como infraestrutura de campos petrolíferos, fornecimento de petróleo bruto, operações de refinaria e transporte de produtos finais (NEIRO; PINTO, 2004). No caso específico da programação de petróleo para refinarias, tem-se um problema complexo que requer solução simultânea para os fluxos de petróleo, a alocação de navios para tanques, a alocação de tanques para unidades e o cálculo de composições do petróleo. É um problema de otimização caracterizado por decisões discretas e várias relações de mistura não-lineares (REDDY; KARIMI; SRINIVASAN, 2004b). Dentre as principais decisões envolvidas, comumente estão: os produtos que devem ser enviados, as quantidades que devem ser transferidas, o tempo operacional exato (horários de início e término) e como estas cotas devem ser distribuídas entre os diversos destinos possíveis (REJOWSKI; PINTO, 2008).

O principal objetivo do refino de petróleo é converter uma grande variedade de petróleos em produtos finais valiosos, como gasolina, combustível de aviação e diesel, por exemplo. O *blending* e o *scheduling* de curto prazo são aspectos críticos neste processo grande e complexo (MÉNDEZ et al., 2006). A obtenção de misturas de melhor qualidade e de menor custo, aliada ao uso mais eficaz dos recursos disponíveis ao longo do tempo, trazem benefícios econômicos e operacionais numerosos e significativos. Técnicas de programação matemática têm sido amplamente utilizadas por diversos autores no planejamento de longo prazo, bem como no planejamento de curto prazo, das operações das refinarias (HASSAN; KANDEIL; ELKHAYAT, 2011; PUROHIT; SURYAWANSHI, 2013).

Na indústria do petróleo, considerada por REDDY; KARIMI; SRINIVASAN (2004b) como sendo uma indústria operacionalmente complexa, de baixa margem e extremamente competitiva, manter um negócio rentável é um grande desafio imposto por preços de matérias-primas em constante mudança e demandas flutuantes de produtos. Para a sobrevivência, as empresas são forçadas a ultrapassar suas fronteiras físicas e a visualizar o ambiente comercial antes de planejar as suas atividades (NEIRO; PINTO, 2004). Dessa forma, a otimização, ao ser aplicada a processos de *planning* e *scheduling* das operações das refinarias, tem servido como ferramenta de apoio na tomada de decisão para os diferentes cenários de produção.

Dados da indústria do refino reportam que cerca de 80% do volume de negócios da empresa estão relacionados a custos de compra do petróleo (REDDY; KARIMI; SRINIVASAN,

2004b). Entretanto, com a otimização do *scheduling* do petróleo, consegue-se uma redução destes custos através do uso de petróleos mais baratos de maneira inteligente. A compra desses lotes mais baratos pode ter um impacto significativo nas margens, tornando-os mais competitivos que as demais matérias-primas disponíveis no mercado. No entanto, algumas dessas matérias-primas podem levar a problemas de processamento, devido à presença de contaminantes, por exemplo, devendo então ser misturadas com outros lotes para manter a confiabilidade da planta (REDDY; KARIMI; SRINIVASAN, 2004b).

A viabilização do processamento destes lotes mais competitivos se dá através da realização de operações de mistura, comumente conhecidas como operações de *blending* (HASSAN; KANDEIL; ELKHAYAT, 2011). Dessa forma, ao ser traçada a estratégia de *scheduling* otimizada, devem ser considerados movimentos que viabilizem essas operações. Dentre os movimentos possíveis, os mais aplicados na prática são: a utilização de tanques de mistura, que são tanques intermediários do sistema, localizados entre os tanques de recebimento de matéria-prima e os tanques que alimentam as unidades, e a operação de mistura em linha, como no caso da alimentação de unidades por tanques em paralelo, por exemplo (SOARES, 2009).

Além das operações de *blending*, outro grande objetivo da programação de recebimento de petróleo deve ser evitar custos com a sobreestadia das embarcações que aguardam nos portos e terminais para a operação de descarga (JOLY, 2012). Denominadas taxas de *demurrage*, essas cobranças adicionais aplicadas ao comprador da carga se referem aos dias de atraso para a sua operação de descarga. Este custo pode ser reduzido, ou até mesmo evitado, se um dos objetivos da programação for a otimização da descarga dos lotes recebidos, priorizando a sua operação na data de sua chegada ao terminal de descarga. Para tal, é necessário o desenvolvimento de um modelo de otimização que priorize a abertura de espaço nos tanques de descarga e a consequente antecipação da operação dos navios programados.

Dados os objetivos a serem atingidos com o *scheduling* do petróleo, os responsáveis pela programação devem escolher o cenário de operação que melhor atende a esses objetivos. Na maioria dos casos, os programadores dependem amplamente de sua experiência para a tomada de decisão e selecionam a primeira solução viável obtida a partir de simulações em modelo de planilha ou em outras ferramentas. No entanto, mesmo que a solução encontrada atenda às restrições do sistema, muitas vezes ela não configura a melhor resposta possível para o cenário em questão. Uma grande oportunidade de melhoria, tanto econômica quanto operacional, é o desenvolvimento de ferramentas de otimização de *scheduling*, modeladas para cada sistema específico, que permitam uma melhor utilização da capacidade do sistema, um maior rendimento das plantas e uma melhor visibilidade e controle gerais em toda a cadeia de suprimentos (REDDY; KARIMI; SRINIVASAN, 2004b). Alguns trabalhos que foram desenvolvidos recentemente na área do refino e que abordaram estas oportunidades de melhoria são CASTILLO-CASTILLO; CASTRO; MAHALEC (2017), CHEN; WANG (2010), GANJI et al. (2013), KUO; CHANG (2008), OLIVEIRA; HAMACHER; ALMEIDA (2011) e REJOWSKI; PINTO (2008).

2.3.2 *Scheduling de Nafta*

A petroquímica é o ramo da indústria química orgânica que emprega como matérias-primas o gás natural, os gases liquefeitos de petróleo, os gases residuais de refinaria, as naftas, e até mesmo os resíduos do refino de petróleo, que configuram correntes de processo que não são de interesse das refinarias. Este é também o ramo industrial de maior

mutação tecnológica: a cada dia se desenvolvem processos mais econômicos e se descobrem novos derivados para a imensa lista de produtos finais oriundos deste ramo da indústria (TORRES, 1997). Apesar das inúmeras possibilidades de diferentes matérias-primas para este setor, no Brasil, a indústria petroquímica consome majoritariamente a nafta, oriunda de refinarias nacionais ou importada de outros países (MEIRELLES; SILVA; RAJAGOPAL, 2015).

O problema de abastecimento de nafta envolve duas operações principais: a entrega de nafta dos terminais e refinarias para as unidades (seleção de fontes e a programação do carregamento e descarregamento da nafta) e mistura da nafta nos tanques de armazenamento antes de alimentar as unidades (transferência da nafta de tanques de armazenamento para um tanque de carga). LEE et al. (2010) consideram ambos os problemas simultaneamente, transformando-os em um único problema de programação linear inteira mista (MILP) que tem como objetivo a minimização da função custo, a qual engloba os preços da nafta, as despesas de frete, os custos de descarga, entre outros fatores. Um exemplo numérico de um caso industrial real é apresentado para ilustrar a aplicabilidade o modelo proposto.

Um sistema logístico típico para operações de recebimento de nafta consiste nas seguintes etapas, como ilustrado na Figura 2. Na primeira, a nafta deve ser comprada e entregue a partir de várias refinarias geograficamente distribuídas, principalmente utilizando navios. Quando a embarcação chega ao terminal de descarga, a nafta é recebida em tanques de armazenamento. Os vários tipos de nafta dos tanques de armazenamento são misturados em um tanque de carga para satisfazer a qualidade da nafta necessária aos fornos de pirólise. Este problema envolve equações bilineares devido às operações de mistura (LEE et al., 1996).

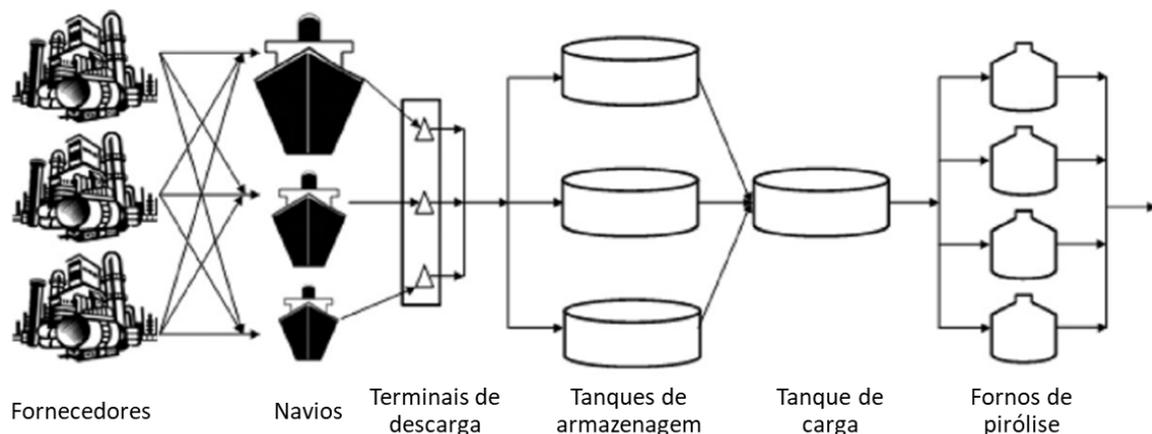


Figura 2: Sistema logístico típico de recebimento de matéria-prima de uma indústria petroquímica de primeira geração. Extraído de LEE et al. (2010).

Dependendo das restrições de produção (limites de processamento de contaminantes) das plantas e das condições de mercado (naftas contendo contaminantes são as mais competitivas para compra), a otimização da mistura de matérias-primas tem um impacto econômico significativo (OTA et al., 2002). Portanto, para problemas de otimização de *scheduling* de nafta que envolvem operações de *blending*, questões econômicas e de qualidade devem ser consideradas simultaneamente. Em geral, matérias-primas mais baratas apresentam menores rendimentos nas unidades de craqueamento por apresentarem qualidades inferiores. Entretanto, como as matérias-primas de alta

qualidade têm elevado valor (LEE et al., 2010), uma operação adequada de mistura de vários tipos de nafta faz-se necessária. Dessa forma, o gerenciamento dos tanques é muito importante para fornecer nafta de baixo custo e de adequada qualidade para as unidades.

No caso do petróleo, o objetivo da estratégia de *blending* é minimizar as trocas bruscas de perfis de qualidade do petróleo entregue às unidades. Já no caso da nafta petroquímica, além de minimizar variações de perfil de matéria-prima, de forma a evitar instabilidades e geração de gargalos de produção na planta, tem-se como objetivo maximizar a concentração de parâmetros que determinam o rendimento em produtos finais desejados e, ainda, enquadrar as concentrações de contaminantes nos limites de processamento das unidades. LEE et al. (2009, 2010), OTA et al. (2002), WANG; FENG; RONG (2014) e ZIMMER (2011) são alguns dos poucos trabalhos que já foram desenvolvidos sobre *scheduling* de nafta. No entanto, nenhum deles considerou as premissas de redução da variação do perfil da matéria-prima e de atendimento dos limites para contaminantes na a construção do modelo de *blending*, o que torna este um campo com muito potencial para estudo e desenvolvimento de ferramentas de otimização.

2.4 Métodos de Resolução de Problemas de Otimização de *Scheduling*

A partir da revisão apresentada, pode ser visto que atualmente estão disponíveis muitas abordagens de programação matemática para o problema de *blending* e *scheduling* de curto prazo. No entanto, de acordo com KARUPPIAH; FURMAN; GROSSMANN (2008), estes modelos matemáticos atingem rapidamente altos níveis de complexidade e raramente podem ser aplicados a situações reais sem que sejam acrescentadas simplificações, as quais distanciam o modelo matemático da realidade operacional. Dentre as suposições adotadas a fim de reduzir a dificuldade inerente ao problema e permitir a aplicabilidade da programação linear, têm-se como exemplos: receitas fixas para diferentes graus de produto são predefinidas; as vazões de componentes e produtos são conhecidas e constantes; ou, ainda, todas as propriedades do produto são consideradas lineares com relação às suas características.

O uso de programação linear, nos termos descritos acima, possui sérias limitações em termos de aplicação a problemas reais de programação de refinarias e petroquímicas. Além das fortes características não-lineares associadas às considerações de qualidade dos produtos, há uma série de decisões inerentes ao problema e que são tradicionalmente modeladas usando programação linear inteira matemática (MILP). A combinação desses dois fatores torna o problema de otimização de *scheduling* muito complexo e difícil de resolver dentro de um tempo simulação razoável quando aplicado a situações reais com horizontes de programação mais extensos (OLIVEIRA; HAMACHER; ALMEIDA, 2011).

Por outro lado, as formulações mais gerais que envolvem programação não-linear inteira mista (MINLP) são capazes de considerar a maior parte dessas características problemáticas. No entanto, como apontado por JIA; IERAPETRITOU; KELLY (2003), KELLY; MANN (2003a, 2003b), é mais difícil resolver aspectos logísticos e de qualidade para problemas de larga escala em um tempo razoável com a utilização de códigos de programação não-linear inteira mista (MINLP) e técnicas de otimização global.

Devido a essas limitações, vários autores destacam a importância de levar em conta outras abordagens usando métodos estocásticos na busca de soluções, no lugar de métodos determinísticos. MARTIN (2009) defende que métodos como os algoritmos genéticos (AGs) são mais apropriados para lidar com problemas extremamente complexos,

na tentativa de obter uma solução suficientemente boa dentro de um prazo razoável. HE; HUI (2007) argumenta que os métodos baseados em MILP apresentam grandes dificuldades em obter soluções aceitáveis para problemas de larga escala dentro de um prazo razoável, portanto a abordagem estocástica pode ser uma alternativa na busca efetiva por soluções confiáveis e, particularmente, os AGs, pelo fato de que eles são voltados especificamente para a otimização de problemas.

Algoritmos genéticos são, talvez, a técnica de busca mais antiga e mais frequentemente usadas para lidar com problemas complexos e intrincados da vida real que são difíceis de resolver pelos métodos tradicionais (JAUHAR; PANT, 2016). KHOSLA; GUPTA; SARAF (2007) propõem um método baseado em GA que aborda especialmente problemas envolvendo uma mistura de produtos, defendendo que a abordagem estocástica não tem nenhuma restrição em relação à sua aplicabilidade a problemas de natureza fortemente não-linear. SIMAO; DIAS; PACHECO (2007) apresentam um problema de *scheduling* de refinaria que é abordado usando um algoritmo genético e resolvendo através dele questões de programação, como agendamento de tarefas e restrições operacionais encontradas em uma refinaria real.

Outros dois trabalhos recentes desenvolvidos neste contexto que podemos citar são BARBOZA et al. (2015) e JOSEPH (2019). O primeiro aborda um problema de programação da produção envolvendo estocagem e distribuição de diesel em uma refinaria de petróleo. Ele utiliza um modelo de programação linear inteira mista (MILP) e um algoritmo genético integrado à programação linear para a resolução do mesmo modelo e conclui que o algoritmo genético obteve desempenho satisfatório em termos de qualidade de solução e tempo computacional quando comparado à modelagem MILP. Já o segundo trabalho, apresenta o desenvolvimento de uma nova abordagem para minimizar o custo total de produção utilizando algoritmos genéticos. Nele são considerados diversos aspectos da cadeia de produção que impactam este custo total e prova-se através de testes a eficiência da ferramenta desenvolvida.

3 Metodologia e Caso de Estudo

Este capítulo apresenta o equacionamento matemático do modelo proposto, assim como a descrição do algoritmo genético desenvolvido para a resolução do modelo de otimização. Em função das especificidades do problema, o caso de estudo será apresentado anteriormente à metodologia utilizada, seguidos por uma breve introdução sobre algoritmos genéticos e pela descrição das características do algoritmo implementado neste trabalho.

3.1 Caso de Estudo

O caso de estudo considerado neste trabalho representa o problema de programação de recebimento de matéria-prima da Braskem. No Brasil, a empresa possui 4 unidades de Químicos, que servem como centrais de matérias-primas para as unidades de Polímeros, sendo a elas interligados terminais aquaviários e refinarias, que são suas fontes de abastecimento. As unidades de Químicos estão localizadas nos mercados consumidores mais importantes e estratégicos do país, constituindo os polos petroquímicos da Bahia, do Rio de Janeiro, de São Paulo e do Rio grande do Sul. Neste contexto, o presente trabalho aborda a cadeia de suprimentos compreendida pela unidade de Químicos 2 (Q2) da Braskem, localizada na cidade de Triunfo (RS). Além do parque de tancagem para armazenagem de matérias-primas existente dentro da unidade, a Q2 ainda conta com tanques de armazenagem localizados em um terminal, o qual recebe as descargas dos navios de nafta, e com um parque de tancagem intermediário a esses dois sistemas.

O sistema de recebimento de nafta em questão, conforme representado na Figura 3, contém os seguintes componentes: uma monoboia e dutos submarinos (duto 0) para descarga dos navios; um parque de tancagem (sistema 1), composto por oito tanques (tanques 1 a 8); um duto que interliga os sistemas 1 e 2 (duto 1); um parque de tancagem (sistema 2) composto por 3 tanques (tanques 9 a 11); um duto que interliga os sistemas 2 e 3 (duto 2); um parque de tancagem na Q2 composto por 6 tanques (tanques 12 a 17); e duas unidades de craqueamento de nafta (plantas 1 e 2, alimentadas pelos dutos 3 e 4, respectivamente). Pode-se resumir a operação deste sistema em quatro operações principais, sendo elas:

- I. Descarga de navios de nafta para tanques de armazenagem do sistema 1 através de sistema de monoboia e dutos submarinos (representados pelo duto 0);
- II. Transferência de nafta dos tanques do sistema 1 para os tanques de armazenagem do sistema 2 através do duto 1;
- III. Transferência de nafta dos tanques do sistema 2 para os tanques de carga do sistema 3 (Q2) através do duto 2;
- IV. Transferência de nafta dos tanques do sistema 3 para a alimentação das plantas 1 e 2 através dos dutos 3 e 4, respectivamente.

Na formulação do problema, os seguintes dados são assumidos como conhecidos:

- I. O horizonte de predição da otimização (HP), onde cada instante da simulação representa um intervalo de três horas na programação real;
- II. Os volumes iniciais de nafta disponíveis em cada tanque do sistema $V(0,j)$ e suas respectivas composições, em termos de parafinidade $P(0,j)$ e contaminantes $X1(0,j)$ e $X2(0,j)$, onde $j=(1, 2, \dots, 17)$;

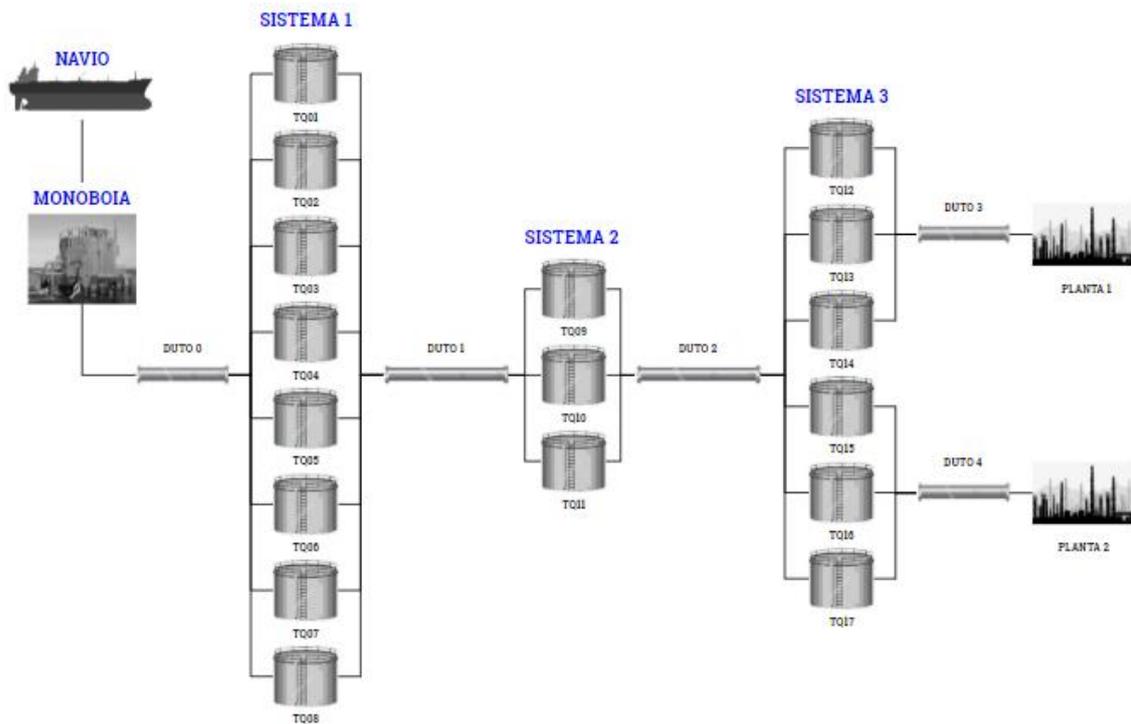


Figura 3: Diagrama esquemático do sistema de recebimento de nafta petroquímica da unidade Q2.

- III. Os navios de nafta disponíveis para operação com suas respectivas informações de quantidades Q_k , composições $P_{0,k}$, $X_{1,0,k}$, $X_{2,0,k}$, vazões de descarga $F_{0,k}$ e datas e horários de início da descarga D_k , onde $k=1,2,\dots,K$ e K é o número de navios programados para descarregar dentro do horizonte de previsão;
- IV. Os volumes operacionais mínimos e máximos para cada tanque do sistema, $V_{\min,j}$ e $V_{\max,j}$, onde $j=1,2,\dots,17$;
- V. Os inventários I_0 , I_1 , I_2 , I_3 e I_4 e vazões de operação F_0 , F_1 , F_2 , F_3 e F_4 para cada duto do sistema.

Definidas as variáveis conhecidas, têm-se então como variáveis de decisão:

- I. Os volumes de nafta a serem descarregados de cada navio para os tanques do sistema 1, que, na modelagem considerada, são representados pela abertura das válvulas de recebimento dos tanques do sistema, a cada instante i da simulação: $z^{E_{i,j}}$ onde $j=1,2,\dots,8$ e $i=1,2,\dots,HP$;
- II. Os volumes de nafta a serem transferidos de cada tanque do sistema 1 para os tanques do sistema 2, que, na modelagem considerada, são representados pela abertura das válvulas de expedição dos tanques do sistema 1 e das válvulas de recebimento dos tanques do sistema 2, a cada instante i da simulação: $z^{S_{i,j}}$ onde $j=1,2,\dots,8$ e $i=1,2,\dots,HP$; $z^{E_{i,j}}$ onde $j=9,10,11$ e $i=1,2,\dots,HP$;
- III. Os volumes de nafta a serem transferidos de cada tanque do sistema 2 para os tanques do sistema 3, que, na modelagem considerada, são representados pela abertura das válvulas de expedição dos tanques do sistema 2 e das válvulas de recebimento dos tanques do sistema 3, a cada instante i da simulação: $z^{S_{i,j}}$ onde $j=9,10,11$ e $i=1,2,\dots,HP$; $z^{E_{i,j}}$ onde $j=12,13,\dots,17$ e $i=1,2,\dots,HP$;
- IV. Os volumes de cada tanque do sistema 3 a serem destinados à alimentação das unidades, que, na modelagem considerada, são representados pela abertura das

válvulas de expedição dos tanques do sistema 3, a cada instante i da simulação: $z^{Si,j}$ onde $j=12,13,\dots,17$ e $i=1,2,\dots,HP$.

3.1.1 Estratégia de Blending

Além das restrições operacionais, como, por exemplo, vazão máxima dos dutos, limites mínimo e máximo de volume de produto dos tanques e impossibilidade de recebimento e expedição simultâneos para um mesmo tanque, restrições de qualidade para o produto a ser entregue para processamento nos tanques finais (sistema 3) também devem ser respeitadas. Essas restrições são impostas pelos limites de processamento de contaminantes dos equipamentos das plantas e são possíveis de serem atendidas através de operações de *blending* dos diferentes lotes de nafta recebidos.

O principal desafio neste problema de programação é, então, alocar a composição correta de nafta no tanque de carga de uma unidade que maximiza tanto a utilização dos principais recursos, entre eles fornos e unidades de separação, quanto a obtenção dos produtos do craqueamento que estiverem mais valorados no mercado. Desta forma, não somente contaminantes, como também parâmetros de rendimento devem ser considerados como requisitos de qualidade para a matéria-prima dos tanques de carga. Como os preços da nafta variam com a sua composição, a alocação ótima da matéria-prima tem um impacto financeiro significativo e deve ser considerada como objetivo da otimização. Então, para a determinação da alocação ótima da nafta nas plantas, é necessário conhecer os parâmetros de rendimento requeridos para a nafta e os contaminantes presentes nela que podem gerar danos às unidades se processados acima dos limites de operação.

A qualidade de uma matéria-prima depende do potencial que ela tem de produzir os produtos-alvo do craqueamento, que são o eteno e o propeno. Correlações de rendimento simples para esses produtos podem ser usadas para expressar a qualidade em função da sua composição. No caso da nafta, que é uma mistura de hidrocarbonetos, o rendimento em produtos finais é avaliado em função dos tipos de hidrocarbonetos contidos nela, sendo eles classificados em parafínicos (P), olefínicos (O), naftênicos (N) e aromáticos (A), os quais podem estar presentes em diversas proporções (ZIMMERMANN; WALZL, 2012). Com base na porcentagem da nafta composta por cada um desses grupos, ela é qualificada como nafta parafínica ou naftênica, classificação esta que é determinante para definição do destino do seu processamento, podendo ser o craqueamento térmico ou a reforma catalítica, respectivamente (MEIRELLES, 2014).

Verifica-se que parafinas, isto é, hidrocarbonetos de cadeia linear, produzem olefinas quando aquecidas a uma temperatura elevada. Já as cadeias ramificadas e os hidrocarbonetos aromáticos, por outro lado, resultam em compostos mais pesados. Observa-se também que o rendimento em olefinas diminui com o aumento do peso molecular dos hidrocarbonetos presentes da matéria-prima. Por exemplo, se o etano for craqueado, ele produzirá 80% de eteno, enquanto que, a partir de propano, butano, nafta e gasóleo como matérias-primas, obtêm-se rendimentos de 45%, 37%, 30% e 25%, respectivamente. Assim, a nafta desejável como matéria-prima deve ter um teor muito elevado de parafinas e uma maior quantidade de compostos mais leves. A nafta para a produção de olefinas tem, portanto, como parâmetro ideal um teor de parafinidade superior a 75% (CHAUDHURI, 2016).

Dadas as características de composição da nafta e os seus impactos no rendimento em produtos finais, conclui-se que, com base no parâmetro parafinidade, é possível determinar o balanço global de geração de gases e líquidos. Portanto, sendo viável obter a partir dele uma adequada gestão da matéria-prima para diferentes cenários de produção, tomou-se como parâmetro de otimização neste trabalho a parafinidade da nafta entregue nos tanques de carga das plantas da unidade. Desta forma, tem-se como função objetivo a minimização das diferenças entre o valor de parafinidade entregue às unidades, através dos tanques do sistema 3, e o valor definido como *setpoint* de operação para um dado cenário de produção. Este valor é um input fornecido pela área responsável pelo planejamento da produção, com base no balanço de produção desejado para cada produto do processo, e neste trabalho foi considerado igual a 75%, valor comumente reportado na literatura como ideal para o processo de craqueamento térmico. Esta função objetivo está sujeita a restrições operacionais, de balanço de massa e qualidade, sendo esta última imposta pelos limites de processamento para cada contaminante que possa estar presente nos lotes de nafta recebidos.

Cinco contaminantes da matérias-primas foram identificados no estudo "*Feedstock Contaminants in Ethylene Plants: An Update*", de 2004, como tendo potencial de causar impactos no processo, tanto em equipamentos, quanto em especificação de produtos finais. Entre eles, estão:

Enxofre: os impactos do enxofre no processo podem se dar de três formas: danos em tubulações e equipamentos, devido à corrosão; envenenamento de catalisadores, especialmente os que são a base de paládio e sofrem envenenamento em níveis inferiores a 0,5 ppm em massa de enxofre total; e perda de especificação de produtos finais, como eteno e propeno, que para o grau de polímero exigem menos de 1 ppm em massa de contaminação por enxofre total (REID; MCPHAUL, 1996). No entanto, certo nível de enxofre na matéria-prima é benéfico para o processo de craqueamento. O enxofre passiva os locais de metal ativo na parede dos tubos dos fornos e reduz as reações de geração de coque e de CO/CO₂. Para evitar este efeito, sulfeto de dimetil (OMS), dissulfeto de dimetil (DMDS) ou um mercaptano são adicionados a matérias-primas isentas de enxofre para controlar a geração de coque (ZIMMERMANN; WALZL, 2012).

Metanol: Propeno contendo metanol em concentrações fora do limite de especificação é uma grande preocupação para as plantas de polímeros, uma vez que MeOH e outros oxigenados são venenos significativos para os catalisadores de metais de transição utilizados para gerar polipropileno (REID; MCPHAUL, 1996).

Cloretos: Cloretos inorgânicos estão presentes na matéria-prima principalmente como NaCl, o que geralmente sugere contaminação com água do mar ou separação insuficiente da salmoura por decantação após a descarga de navios para tanques. Durante o processo, eles são convertidos em ácido clorídrico, o que pode causar corrosão nos equipamentos e linhas da unidade. Além disso, cloretos inorgânicos podem gerar alguns problemas associados ao sódio, os quais serão detalhados mais adiante, já que a fonte de cloretos inorgânicos é tipicamente o NaCl. Já os cloretos orgânicos geralmente se decompõem em HCl, que se dissolve na água de *quench*, reduzindo o seu pH. Dependendo do projeto, das condições de operação e de outras particularidades do processo, eles ainda podem causar corrosão no sistema de água de *quench* (TAGOE; RAMHANY, 1993).

Sódio: Ele pode causar impactos como problemas nos tubos da seção da convecção ou da radiação dos fornos, devido à fusão de sódio com o metal dos tubos e a ocorrência de

fissuras por tensão em equipamentos. Além disso, o sódio acelera os problemas de corrosão causados pelo vanádio (TAGOE; RAMHANY, 1993).

Dióxido de carbono: É removido porque pode congelar a baixas temperaturas em equipamentos de troca de calor e fracionamento. O dióxido de carbono também pode ser absorvido no eteno, afetando a qualidade do produto e o seu posterior processamento, uma vez que é considerado veneno para os catalisadores utilizados na produção de polietileno (ZIMMERMANN; WALZL, 2012).

Em função das diferentes tecnologias existentes e dos distintos modos de operação adotados pelas empresas, cada planta apresenta restrições específicas de processamento de determinados contaminantes, sendo que, para cada contaminante, os limites de processamento podem variar de uma planta para a outra. Sendo assim, por questões de segurança da informação da unidade estudada, foram considerados neste trabalho dois contaminantes quaisquer para fins de modelagem e simulação dos cálculos relativos às operações de *blending*. As suas concentrações são dadas por X1 e X2, com unidades de ppm em massa, e os seus limites de concentração na carga das plantas foram atribuídos arbitrariamente, com base em valores comumente reportados na literatura para os contaminantes mais conhecidos, e são iguais a 200 ppm e 5 ppm, respectivamente.

3.2 Metodologia

3.2.1 Equacionamento do Problema

As próximas seções apresentam as equações do modelo matemático desenvolvido para a cadeia de suprimento de nafta apresentada na seção 3.1, destacando suas particularidades, no que diz respeito a variáveis de decisão, balanços de massa, restrições operacionais, restrições de qualidade e função objetivo.

Função Objetivo

A função objetivo deste problema de otimização consiste em minimizar a soma das diferenças entre o valor de parafinidade entregue às unidades, através os tanques do sistema 3, e o valor definido como *setpoint* de operação para um dado horizonte de predição. A função objetivo aplica-se apenas aos tanques da Q2, uma vez que estes são os únicos tanques do sistema todo destinados à carga das unidades, e está sujeita a restrições de balanço de massa, operacionais e de qualidade, as quais serão definidas nas próximas seções. Matematicamente, a função objetivo em questão é dada por:

$$FO = \min \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} |P_{i,j} - P_{SP}| \quad (1)$$

onde j é o índice dos tanques do sistema, i é o instante da simulação e HP é o tamanho do horizonte de predição, ou seja, é o número total de instantes da simulação.

Variáveis de Decisão

Com o objetivo de facilitar a construção do modelo, o conjunto de válvulas do problema em questão foi dividido em 7 subconjuntos, da seguinte forma:

1. Válvulas de entrada dos tanques do sistema 1 (tanques 1 a 8)
2. Válvulas de saída dos tanques do sistema 1 (tanques 1 a 8)
3. Válvulas de entrada dos tanques do sistema 2 (tanques 9 a 11)

4. Válvulas de saída dos tanques do sistema 2 (tanques 9 a 11)
5. Válvulas de entrada dos tanques do sistema 3 (tanques 12 a 17)
6. Válvulas de saída dos tanques do sistema 3 destinados à planta 1 (tanques 12 a 14)
7. Válvulas de saída dos tanques do sistema 3 destinados à planta 2 (tanques 15 a 17)

As variáveis de decisão do problema são, portanto, as aberturas das válvulas de entrada e saída de cada tanque do sistema, as quais totalizam 34 variáveis, para cada um dos instantes da simulação, os quais representam intervalos de 3 horas. O status de abertura ou fechamento das válvulas para cada um dos 17 tanques do sistema é dado pelas variáveis binárias a seguir:

$$z_{i,j}^E, z_{i,j}^S \in \{0,1\} \quad (2)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$ e $j=1,2,\dots,17$.

Desta forma, os *status* possíveis para as válvulas são:

$z_{i,j}^E = 1$, se a válvula de entrada do tanque j está aberta durante o intervalo de tempo i
 $= 0$, caso contrário

$z_{i,j}^S = 1$, se a válvula de saída do tanque j está aberta durante o intervalo de tempo i
 $= 0$, caso contrário

Restrições de Balanço de Massa

Os balanços de massa globais (BMG) para os tanques de cada um dos três subsistemas, onde $i=1,2,\dots,HP$, são dados, respectivamente, por:

- Sistema 1:

$$V_{i,j} = V_{i-1,j} + F^0 \cdot \Delta t \cdot z_{i-1,j}^E - F^1 \cdot \Delta t \cdot z_{i-1,j}^S \quad (3)$$

onde $j=1,2,\dots,8$.

- Sistema 2:

$$V_{i,j} = V_{i-1,j} + F^1 \cdot \Delta t \cdot z_{i-1,j}^E \cdot \sum z_{i-1,m}^S - F^2 \cdot \Delta t \cdot z_{i-1,j}^S \quad (4)$$

onde $j=9,10,11$ e $m=1,2,\dots,8$.

- Sistema 3:

$$V_{i,j} = V_{i-1,j} + F^2 \cdot \Delta t \cdot z_{i-1,j}^E \cdot \sum z_{i-1,m}^S - F^3 \cdot \Delta t \cdot z_{i-1,j}^S \quad (5)$$

onde $j=12,13,14$ e $m=9,10,11$, e:

$$V_{i,j} = V_{i-1,j} + F^2 \cdot \Delta t \cdot z_{i-1,j}^E \cdot \sum z_{i-1,m}^S - F^4 \cdot \Delta t \cdot z_{i-1,j}^S \quad (6)$$

onde $j=15,16,17$ e $m=9,10,11$.

Já os balanços de massa por componente (BMC) para os tanques de cada um dos três subsistemas, são dados, respectivamente, por:

- Sistema 1:

- Parafinicidade:

$$P_{i,j} = (V_{i-1,j} \cdot P_{i-1,j} + F^0_{i-1} \cdot P^0_{i-1} \cdot \Delta t \cdot z^E_{i-1,j} - F^1 \cdot P_{i-1,j} \cdot \Delta t \cdot z^S_{i-1,j}) / V_{i,j} \quad (7)$$

- Contaminantes:

$$X^k_{i,j} = (V_{i-1,j} \cdot X^k_{i-1,j} + F^0_{i-1} \cdot X^{k,0}_{i-1} \cdot \Delta t \cdot z^E_{i-1,j} - F^1 \cdot X^k_{i-1,j} \cdot \Delta t \cdot z^S_{i-1,j}) / V_{i,j} \quad (8)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$; $j=1,2,\dots,8$; e $k=1,2$.

- Sistema 2:

- Parafinicidade:

$$P_{i,j} = (V_{i-1,j} \cdot P_{i-1,j} + F^1 \cdot \Delta t \cdot z^E_{i-1,j} \cdot \sum z^S_{i-1,m} \cdot P_{i-1,m} - F^2 \cdot P_{i-1,j} \cdot \Delta t \cdot z^S_{i-1,j}) / V_{i,j} \quad (9)$$

- Contaminantes:

$$X^k_{i,j} = (V_{i-1,j} \cdot X^k_{i-1,j} + F^1 \cdot X^k_{i-1,m} \cdot \Delta t \cdot z^E_{i-1,j} \cdot \sum z^S_{i-1,m} - F^2 \cdot X^k_{i-1,j} \cdot \Delta t \cdot z^S_{i-1,j}) / V_{i,j} \quad (10)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$; $j=9,10,11$; $k=1,2$; e $m=1,2,\dots,8$.

- Sistema 3:

- Parafinicidade:

$$P_{i,j} = (V_{i-1,j} \cdot P_{i-1,j} + F^2 \cdot \Delta t \cdot z^E_{i-1,j} \cdot \sum z^S_{i-1,m} \cdot P_{i-1,m} - F^3 \cdot P_{i-1,j} \cdot \Delta t \cdot z^S_{i-1,j}) / V_{i,j} \quad (11)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$; $j=12,13,14$; $k=1,2$; e $m=9,10,11$.

$$P_{i,j} = (V_{i-1,j} \cdot P_{i-1,j} + F^2 \cdot \Delta t \cdot z^E_{i-1,j} \cdot \sum z^S_{i-1,m} \cdot P_{i-1,m} - F^4 \cdot P_{i-1,j} \cdot \Delta t \cdot z^S_{i-1,j}) / V_{i,j} \quad (12)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$; $j=15,16,17$; $k=1,2$; e $m=9,10,11$.

- Contaminantes:

$$X^k_{i,j} = (V_{i-1,j} \cdot X^k_{i-1,j} + F^2 \cdot X^k_{i-1,m} \cdot \Delta t \cdot z^E_{i-1,j} \cdot \sum z^S_{i-1,m} - F^3 \cdot X^k_{i-1,j} \cdot \Delta t \cdot z^S_{i-1,j}) / V_{i,j} \quad (13)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$; $j=12,13,14$; $k=1,2$; e $m=9,10,11$.

$$X^k_{i,j} = (V_{i-1,j} \cdot X^k_{i-1,j} + F^2 \cdot X^k_{i-1,m} \cdot \Delta t \cdot z^E_{i-1,j} \cdot \sum z^S_{i-1,m} - F^4 \cdot X^k_{i-1,j} \cdot \Delta t \cdot z^S_{i-1,j}) / V_{i,j} \quad (14)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$; $j=15,16,17$; $k=1,2$; e $m=9,10,11$.

Restrições Operacionais

Dentre as restrições operacionais existentes no sistema estudado, consideraram-se, para fins de modelagem, aquelas relacionadas ao volume de produto nos tanques, ao *status* de abertura e fechamento das válvulas dos tanques, e às trocas excessivas de tanques de recebimento/expedição. A seguir, seguem as formulações para cada uma das três classes de restrições operacionais.

Volume de produto nos tanques: Cada tanque do sistema apresenta volumes operacionais mínimos e máximos, em metros cúbicos, restrições que devem ser respeitadas ao serem impostas ao modelo através das seguintes equações:

$$V_{i,j} \geq V_{min} = 5000 \quad (15)$$

$$V_{i,j} \leq V_{max} = 40000 \quad (16)$$

onde $j=1,2,\dots,17$ e $i=1,2,\dots,HP$.

Status de abertura e fechamento das válvulas: Para o status de abertura e fechamento (indicados pelos índices 1 e 0, respectivamente) de cada válvula do sistema, têm-se como restrição global que nenhum dos tanques do sistema pode receber produto ao mesmo tempo que expede. Dessa forma, tem-se como restrição geral para os três parques de tancagem:

$$\sum z_{i,j}^E + z_{i,j}^S \leq 1 \quad (17)$$

onde $j=1,2,\dots,17$ e $i=1,2,\dots,HP$.

Além da restrição geral aplicada às válvulas de todos os tanques do sistema, têm-se restrições específicas aplicadas a cada um dos parques de tancagem, sendo elas:

- Sistema 1: Pelo menos um e no máximo um tanque deve estar com a válvula de entrada aberta para recebimento da descarga do navio e no máximo um tanque pode estar com a válvula de saída aberta.

$$\sum_{j=1}^8 z_{i,j}^E = 1 \quad (18)$$

$$\sum_{j=1}^8 z_{i,j}^S \leq 1 \quad (19)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$.

- Sistema 2: Pelo menos um e no máximo um tanque deve estar com a válvula de entrada aberta para recebimento das cotas do duto 1 e no máximo um tanque pode estar com a válvula de saída aberta.

$$\sum_{j=9}^{11} z_{i,j}^E = 1 \quad (20)$$

$$\sum_{j=9}^{11} z_{i,j}^S \leq 1 \quad (21)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$.

- Sistema 3: Pelo menos um e no máximo um tanque deve estar com a válvula de entrada aberta para recebimento das cotas do duto 2 e pelo menos dois e no máximo dois tanques podem estar com a válvula de saída aberta para alimentação das duas plantas da unidade.

$$\sum_{j=12}^{17} z_{i,j}^E = 1 \quad (22)$$

$$\sum_{j=12}^{14} z_{i,j}^S = 1 \quad (23)$$

$$\sum_{j=15}^{17} z_{i,j}^S = 1 \quad (24)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$.

Tamanho mínimo de cota: Devido à impossibilidade de realizar mudanças nos alinhamentos dos tanques recebedores/expedidores frequentemente, faz-se necessária

uma restrição operacional referente ao tamanho mínimo da quota que um mesmo tanque pode receber ou expedir. Dessa forma, evita-se a troca excessiva de alinhamentos, que são operações inviáveis de serem realizadas na prática devido ao elevado número de manobras e à grande demanda de pessoal responsável para executá-las. Os tamanhos mínimos para as cotas foram definidos na formulação do modelo para cada um dos sete subconjuntos de válvulas definidos anteriormente. Os limites impostos são equivalentes a pelo menos seis horas (ou 2 instantes de tempo da simulação) de envio e/ou recebimento ininterruptos para os subconjuntos 1 a 5 e a pelo menos doze horas (ou 4 instantes de tempo da simulação) para os subconjuntos 6 e 7.

Restrições de Qualidade

Estas restrições referem-se à qualidade da matéria-prima e são impostas ao sistema devido aos limites de processamento de contaminantes existentes nas plantas estudadas. Para fins de modelagem, foram considerados dois contaminantes genéricos, cujas concentrações são dadas por X_1 e X_2 , e cujos limites de concentração na carga das unidades são 200 ppm e 5 ppm, respectivamente. Além das restrições para os contaminantes, tem-se uma restrição para o valor mínimo de parafinidade que deve ser entregue nos tanques do sistema 3. Este valor mínimo de parafinidade (P_{min}) é igual ao valor definido como *setpoint* para a parafinidade (P_{SP}). Definidas as restrições de qualidade, as suas equações são dadas a seguir e são válidas apenas para os tanques do sistema 3, uma vez que estes são os únicos tanques do sistema todo destinados à carga das unidades, para os quais tais análises de qualidade são aplicáveis.

$$X_{i,j}^1 \leq X_{max}^1 = 200 \quad (25)$$

$$X_{i,j}^2 \leq X_{max}^2 = 5 \quad (26)$$

$$P_{i,j} \geq P_{min} = P_{SP} = 75 \quad (27)$$

onde $i=1,2,\dots,HP$ e $j=12,13,\dots,17$.

3.2.2 Algoritmos Genéticos

Algoritmos genéticos (AGs) são métodos de busca baseados nos princípios da seleção natural e da genética. São algoritmos evolucionários, ou seja, são baseados na Teoria da Evolução Natural de Darwin, a qual propõe a sobrevivência dos indivíduos mais aptos ao longo da evolução das gerações. Os AGs foram propostos inicialmente por Holland e seus colegas em 1975 e funcionam através da busca direta, sendo usados para encontrar soluções ótimas ou aproximadas para problemas de busca e otimização (HOLLAND, 1992). Problemas desse tipo possuem dois componentes principais: o espaço de busca, que é composto por todas as possíveis soluções de um determinado problema, e a função de avaliação (ou função aptidão), que é uma forma de avaliar os membros do espaço de busca quanto à sua capacidade de atender à função objetivo e às restrições do problema em questão.

Os métodos de otimização determinísticos iniciam-se com um único candidato à solução que, iterativamente, é manipulado utilizando algumas heurísticas (estáticas) diretamente associadas ao problema a ser solucionado. Geralmente, estes processos heurísticos não são algorítmicos e sua simulação em computadores pode ser muito complexa. Já as técnicas evolucionárias, operam sobre todos os indivíduos de uma

população de forma paralela. Assim, elas podem fazer a busca em diferentes áreas do espaço de solução, alocando um número de membros apropriado para a busca em várias regiões. As buscas são paralelas e estruturadas, mas aleatórias, e são voltadas em direção à busca de pontos de "alta aptidão", ou seja, pontos nos quais a função a ser minimizada (ou maximizada) tem valores relativamente baixos (ou altos). Esses processos iterativos, quando aplicados a uma população de indivíduos, têm suas iterações chamadas de gerações, sendo que, a cada geração, os princípios de seleção, reprodução e mutação são aplicados com a finalidade de evolução das populações (GOLDBERG, 1989).

Inicialmente, é gerada uma população formada por um conjunto aleatório de indivíduos, que podem ser vistos como possíveis soluções do problema. Durante o processo evolutivo, esta população é avaliada: para cada indivíduo é atribuída uma nota, refletindo sua habilidade de adaptação a determinado ambiente. Uma porcentagem dos mais adaptados são mantidos, enquanto os outros são descartados (darwinismo), configurando assim a etapa denominada seleção. Os membros mantidos pela seleção podem sofrer modificações em suas características através de mutação e de *crossover* (cruzamento), gerando descendentes para a próxima geração. Este processo é então repetido até que uma solução satisfatória seja encontrada.

Algoritmos genéticos são muito eficientes para busca de soluções ótimas, ou aproximadamente ótimas, em uma grande variedade de problemas, pois não impõem muitas das limitações encontradas nos métodos de busca tradicionais. Além disso, são capazes de identificar e explorar fatores ambientais e convergir para soluções ótimas, ou aproximadamente ótimas, em níveis globais. Eles podem ser aplicados para resolver uma variedade de problemas de otimização para os quais algoritmos de otimização padrão não são adequados, como problemas nos quais a função objetivo é descontínua, não-diferenciável, estocástica ou altamente não-linear. Segundo (GOLDBERG, 1989) os algoritmos genéticos diferem dos métodos tradicionais de busca e otimização devido a quatro aspectos principais:

- I. Trabalham com uma codificação do conjunto de parâmetros e não com os parâmetros em si;
- II. Trabalham com uma população de pontos e não com um único ponto;
- III. Utilizam informações de custo ou recompensa (função objetivo) e não derivadas ou outro conhecimento auxiliar;
- IV. Utilizam regras de transição probabilísticas e não determinísticas.

3.2.3 Descrição do Algoritmo Implementado

Ao se construir um algoritmo genético para resolver o problema de fornecimento de matéria-prima, cinco etapas fundamentais que determinam o desempenho do AG foram consideradas, sendo elas: a representação cromossômica, a inicialização da população, a função de avaliação, os operadores genéticos e os critérios de terminação. Nas subseções seguintes, essas questões são introduzidas e descritas especificamente para o AG implementado neste trabalho.

Representação Cromossômica

Para qualquer AG, é necessária uma representação cromossômica para descrever cada indivíduo na população. É ela que determina como o problema é estruturado no AG, bem como os operadores genéticos que podem ser utilizados. No entanto, nem todas as

combinações das variáveis de decisão constituem uma solução (indivíduo) viável. Para a decisão da programação de fornecimento de nafta, a representação cromossômica é dada por vetores binários, onde cada elemento de um vetor denota a abertura (1) ou o fechamento (0) de uma determinada válvula do sistema. A Figura 4 mostra o indivíduo composto por um vetor binário, que representa o sorteio do status de cada válvula do sistema (17 tanques com 2 válvulas cada, totalizando 34 válvulas) para cada instante do horizonte de previsão (HP), cujo tamanho foi considerado igual a 56 no modelo proposto.

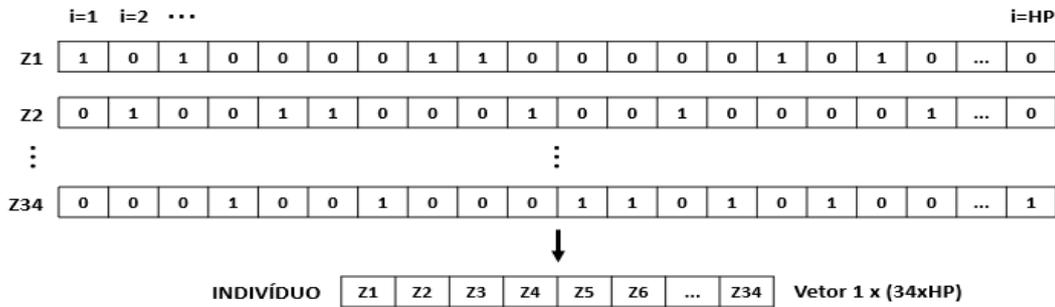


Figura 4: Vetor binário de tamanho 1 x (34 x HP) que representa um indivíduo da população de possíveis soluções.

Inicializando a População

A população inicial contém 100 indivíduos (cromossomos), os quais são formados aleatoriamente com base no limite superior e inferior para cada uma das variáveis de decisão (genes), que neste caso são 1 e 0, respectivamente. Para gerá-la, são sorteados 5.000 indivíduos de forma aleatória, os quais são ranqueados, com base no valor de suas aptidões, e os 100 indivíduos mais aptos são escolhidos para compor a população inicial.

Função de Avaliação (Função Aptidão)

Cada solução gerada é simulada para determinar seu desempenho através da função de avaliação (ou função aptidão), a qual determina a aptidão de um indivíduo, ou seja, a sua capacidade de solucionar o problema atendendo a função objetivo e respeitando as restrições impostas a ele. A probabilidade de um indivíduo ser selecionado para reprodução baseia-se no seu índice de aptidão que, no algoritmo desenvolvido, é calculado considerando atendimento à função objetivo, às restrições operacionais e às restrições de qualidade do problema. Portanto, indivíduos que atendem à função objetivo e respeitam um número maior de restrições em relação aos demais serão os que apresentarão as maiores aptidões. A função aptidão final obtida para o algoritmo desenvolvido é representada pela equação 28.

$$F_{AG} = -10^3 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} \left(\max \left(0, (P_{min} - P_{i,j}) \right) \right) + 10^{-3} \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} \left(\min \left(0, (P_{min} - P_{i,j}) \right) \right) - 10^3 \cdot \left(\sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=1}^{17} \left(\max \left(0, (V_{min} - V_{i,j}) \right) \right) + \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=1}^{17} \left(\max \left(0, (V_{i,j} - V_{max}) \right) \right) \right) - 10^3 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} \left(\max \left(0, (X1_{i,j} - X1_{max}) \right) \right) - 10^3 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} \left(\max \left(0, (X2_{i,j} - X2_{max}) \right) \right) - 10^1 \cdot TQ \quad (28)$$

Os dois primeiros termos da função aptidão referem-se à função objetivo do problema de otimização estudado e os demais termos referem-se às restrições impostas a ele. Cada um dos termos será explicado detalhadamente ao longo do capítulo 4.

Operadores Genéticos

A formação de novos indivíduos para composição das gerações subseqüentes a partir da geração inicial é realizada pela aplicação de operadores genéticos em pais selecionados. A seleção é o operador genético mais simples e pode ser baseada em diferentes critérios de seleção de indivíduos. A mutação é o operador genético o qual confere uma modificação nos cromossomos (indivíduos) através da alteração do valor de genes específicos, da inversão de genes entre suas posições ou da soma/subtração de pequenos valores a alguns genes selecionados. Já o *crossover* (ou cruzamento), é o operador no qual pontos de cruzamento são escolhidos aleatoriamente dentro dos cromossomos para cada par de pais a ser combinado, podendo ocorrer em um único ponto ou em múltiplos pontos. Os três operadores descritos são aplicados na formação de cada nova geração.

A seleção de pais para produzir as novas gerações é muito importante na condução da busca pela solução ótima. O objetivo é dar uma chance maior de seleção aos indivíduos mais aptos. Para tal, no algoritmo desenvolvido o operador genético de seleção se dá da seguinte forma: as aptidões são calculadas para cada um dos 100 indivíduos da população atual e os mesmos são ordenados do menos apto ao mais apto. Então, os 20 indivíduos com maiores aptidões são selecionados para compor parte da geração seguinte, sem serem modificados. Para a formação dos demais indivíduos da nova população, os 60 indivíduos da população anterior com maiores aptidões são selecionados para sofrerem *crossover* e os 20 melhores são novamente selecionados para sofrerem mutação.

No algoritmo desenvolvido, o indivíduo, vetor binário de tamanho (34 x HP), é convertido em um vetor inteiro de tamanho (7 x HP) para facilitar a sua manipulação pelos operadores genéticos, conforme demonstrado na Figura 5. Este novo vetor representa os tanques que estão com a válvula de entrada ou saída aberta em um dado instante da simulação. O vetor é composto por sete partes de tamanho HP, referentes aos sete subconjuntos de válvulas definidos na seção 3.2.1. A mutação se dá, então, pela alteração do valor de genes (números dos tanques sorteados) específicos. Tanto a posição dos genes a serem alterados, quanto o novo valor a ser atribuído a eles, são sorteados de forma aleatória dentro do range de possibilidades de cada sorteio. No caso da posição, há um conjunto de sete sorteios para cada indivíduo (cromossomo), os quais ocorrem um em cada subconjunto de válvulas do sistema e, para cada um desses sete pontos sorteados, há um novo sorteio para a escolha do novo valor do gene sorteado. Para o operador *crossover*, também são sorteados sete pontos do cromossomo, um em cada subconjunto, para que haja cruzamento de informações dos genes dos pais, de forma a gerar dois descendentes. Os dois cromossomos resultantes deste processo receberam, de forma intercalada a cada ponto de cruzamento, genes de ambos os pais. As Figuras 6 e 7 exemplificam os processos utilizados para cada operador genético no algoritmo aplicado neste trabalho.

Critérios de Terminação

O AG é finalizado após um número especificado de gerações. Neste trabalho, após uma seqüência de testes e verificação dos melhores desempenhos e resultados, foi adotado um número total de gerações igual a 200. A Tabela 1 apresenta um resumo dos *inputs* necessários para a simulação com o algoritmo desenvolvido.

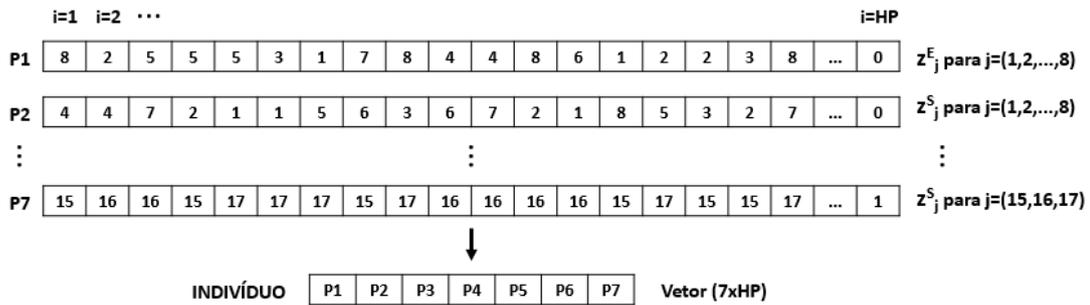


Figura 5: Representação do vetor indivíduo no formato dos subconjuntos de válvulas definidos na seção 3.2.1.

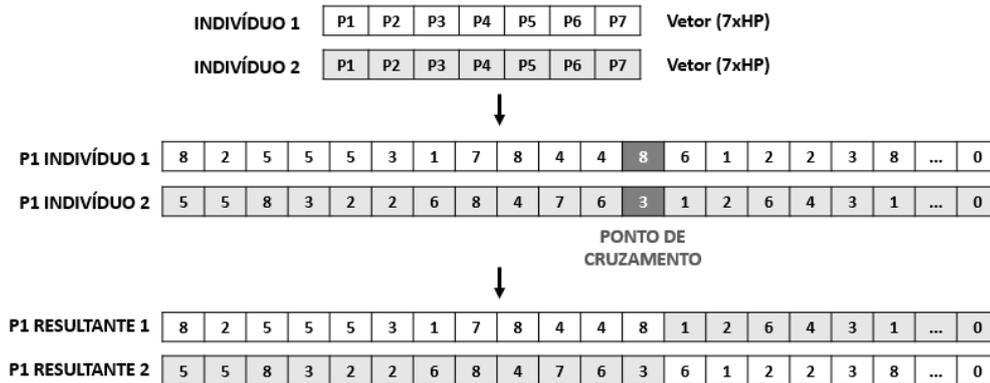


Figura 6: Operador genético de *crossover* implementado neste trabalho.

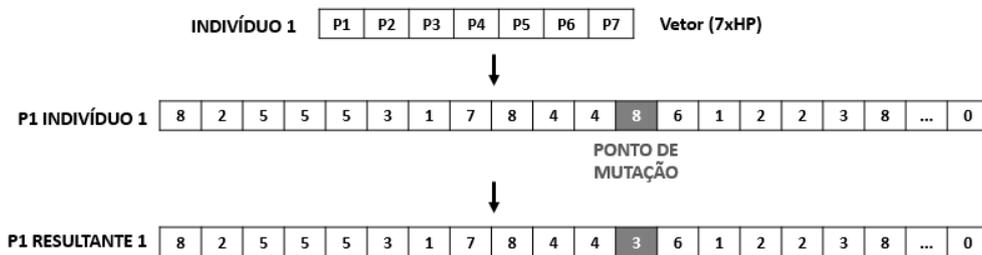


Figura 7: Operador genético de *mutação* implementado neste trabalho.

Tabela 1: Parâmetros de entrada necessários para a simulação.

Parâmetros de entrada	Variáveis
Tamanho do horizonte de previsão	HP
Composições e volumes iniciais dos tanques	$V(0,j), P(0,j), X1(0,j), X2(0,j)$
Quantidades, composições, vazões e datas/horários de descarga dos navios programados	$Q_k, P_{0,k}, X1_{0,k}, X2_{0,k}, F_{0,k}, D_k$
Volumes operacionais mínimos e máximos dos tanques	V_{min}, V_{max}
Inventários e vazões de operação dos dutos	$I_0, I_1, I_2, I_3, I_4, F_0, F_1, F_2, F_3, F_4$
Restrições de qualidade	$P_{min}, X1_{max}, X2_{max}$

4 Resultados e Discussões

A solução do problema de otimização consistiu em duas etapas. A primeira delas foi a criação de um algoritmo genético em *MatLab* para a resolução do problema estudado, considerando apenas parte das restrições existentes, o qual será apresentado na seção 4.1. E a segunda foi a adição das equações para as demais restrições do caso de estudo, ao longo de uma série de etapas de avaliação. As próximas subseções apresentam os resultados obtidos para cada uma das duas etapas e os resultados de testes realizados com o modelo final obtido.

4.1 Codificação do Algoritmo Genético

Após uma série de testes, o algoritmo genético obtido apresenta populações de cem indivíduos, configurando cem possíveis soluções para o problema, e os mesmos tem sua aptidão melhorada ao longo de duzentas gerações (iterações). Processos de seleção, reprodução e mutação descritos na seção 3.2.2 são utilizados para o aprimoramento dos indivíduos ao longo das gerações e garantem que a busca é aleatória e direcionada no sentido das soluções com melhores aptidões. O resultado é uma solução aproximada para a solução ótima global do problema de otimização em questão. A Figura 8 mostra a evolução das aptidões dos indivíduos ao longo das gerações.

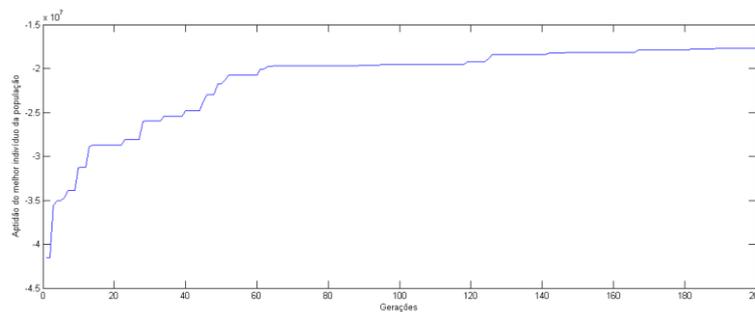


Figura 8: Evolução da aptidão do melhor indivíduo da população ao longo das gerações.

4.2 Testes para inclusão das restrições

4.2.1 Cenário I: Algoritmo Base

Para a inclusão no algoritmo de todas as restrições do caso de estudo mapeadas no capítulo 3, iniciou-se com o teste de um algoritmo base que considerava apenas parte delas, as quais são indicadas a seguir.

Premissas consideradas

- I. Função objetivo: minimizar as diferenças entre o valor de parafinidade entregue nos tanques do sistema 3 e o valor de parafinidade estabelecido como ótimo para um dado cenário de operação;
- II. Restrição de valor de parafinidade mínimo para os tanques do sistema 3;
- III. Restrições de volumes máximos e mínimos de produto nos tanques dos sistemas 1, 2, e 3;
- IV. Restrições de número máximo e mínimo de tanques com válvulas abertas para cada sistema de tancagem a cada instante da simulação.

As premissas I e II foram implementadas como penalidades através da combinação dos dois primeiros termos da função aptidão, e premissa III foi implementada através da adição

do terceiro termo da função aptidão, conforme indicado na equação 29. Já a premissa IV foi considerada na formulação do algoritmo através de um sorteio de tanques no momento da geração dos indivíduos, o qual resulta em um único tanque receptor e um único tanque expedidor para cada sistema a cada instante de tempo. Esta formulação atende a premissa IV sem a necessidade de inclusão de um termo na função aptidão, como é feito nos demais casos, uma vez que considera inviáveis indivíduos que desrespeitem esta restrição. Os pesos para cada termo da função aptidão foram determinados após uma sequência de testes para definição da proporção ideal de participação de cada parcela.

Função aptidão

$$F_{AG} = -10^3 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\max(0, (P_{min} - P_{i,j}))) + 10^{-3} \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\min(0, (P_{min} - P_{i,j}))) - 10^3 \cdot (\sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=1}^{17} (\max(0, (V_{min} - V_{i,j}))) + \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=1}^{17} (\max(0, (V_{i,j} - V_{max})))) \quad (29)$$

Como é mostrado nos índices dos somatórios, os dois primeiros termos da função aptidão aplicam-se apenas aos tanques do sistema 3 (tanques 12 a 17), conforme definido na seção 3.2.1.

Resultados obtidos

No que diz respeito às premissas I e II, o modelo tende a ajustar as parafinidades de cada tanque do sistema 3 para valores acima de 75% ao decorrer do tempo (premissa II), não ultrapassando valores acima de 77% (premissa I), como pode ser visto na Figura 9. Já para a premissa III, o modelo respeita ambas as restrições de volume máximo e mínimo, como pode ser visto na Figura 10, sem infringi-las em nenhum momento ao longo da simulação. Entretanto, observa-se que, para atender as restrições impostas a resposta do modelo apresenta conflito de tanques recebendo e expedindo simultaneamente, o que é uma restrição operacional do sistema real. No total, foram identificados 47 conflitos, como pode ser visto na Figura 11, a qual representa o sorteio de tanques para cada um dos sete conjuntos de válvulas definidos na seção 3.2.1. Estes conflitos identificados serão tratados na próxima seção.

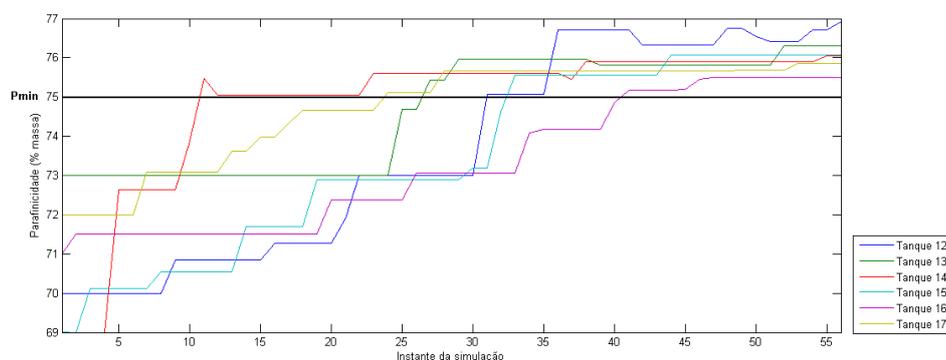


Figura 9: Parafinidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação com o algoritmo base.

4.2.2 Cenário II: Inclusão da restrição de recebimento e expedição simultâneos

O cenário II considera as mesmas premissas pertencentes ao cenário I (premissas I a IV), porém com a inclusão da seguinte premissa:

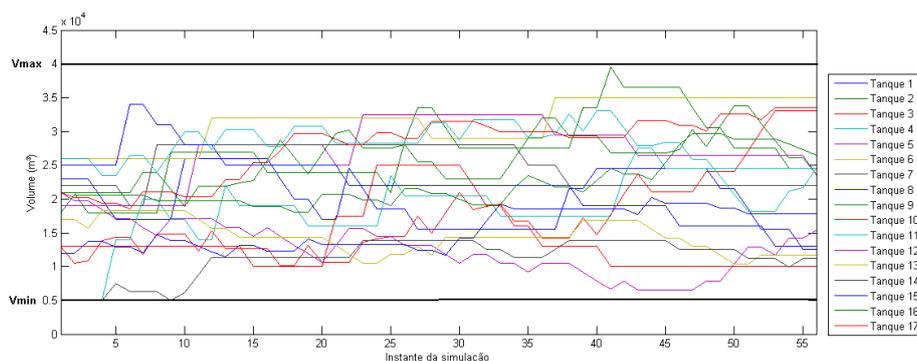


Figura 10: Volume dos tanques dos sistemas 1, 2 e 3 ao longo da simulação com o algoritmo base.

TEMPO	DUTO 0	P1	SISTEMA 1	P2	DUTO 1	P3	SISTEMA 2	P4	DUTO 2	P5	SISTEMA 3	P6	DUTO 3	P7	DUTO 4
1		6		1		10	CONFLITO	10		16		12		17	
2		3		2		10	CONFLITO	10		15	CONFLITO	13		15	
3		8		1		10		11		13		17		12	
4		3		2		10	CONFLITO	10		14		12		15	
5		5		1		11		8		17	CONFLITO	14		17	
6		4		2		9		10		17		12		15	
7		5		1		10		11		15		12		16	
8		8		1		11		9		12		14		15	
9		2		4		11		9		14	CONFLITO	14		17	
10		4		2		9		10		14		13		15	
11		3		2		10		11		14		13		15	
12		1		2		11		10		17		12		15	
13		7		4		9	CONFLITO	9		15	CONFLITO	13		15	
14		3	CONFLITO	3		9	CONFLITO	9		17		12		16	
15		2		4		9		11		12	CONFLITO	12		15	
16		6		4		9		10		17	CONFLITO	12		17	
17		3	CONFLITO	3		11		9		17		12		16	
18		1		2		10		9		15	CONFLITO	12		15	
19		4	CONFLITO	4		9		10		16		12		15	
20		7		1		9		11		12		13		17	
21		4		7		9	CONFLITO	9		12		13		17	
22		3		7		10		9		14		13		16	
23		7		3		10	CONFLITO	10		17	CONFLITO	12		17	
24		6		5		10	CONFLITO	10		13	CONFLITO	13		16	
25		4	CONFLITO	4		9	CONFLITO	9		16		12		17	
26		8		2		10		9		13	CONFLITO	12		15	
27		2		3		11		10		17		13		16	
28		5	CONFLITO	5		10		9		13		12		15	
29		3		8		10		11		15		12		16	
30		4	CONFLITO	4		11		10		12	CONFLITO	12		16	
31		1		5		10	CONFLITO	10		15		14		17	
32		2		8		10	CONFLITO	10		15		12		17	
33		3		7		9		10		16		14		15	
34		4		6		9		11		16	CONFLITO	12		16	
35		7		4		9		10		12	CONFLITO	12		16	
36		2		1		11	CONFLITO	11		14	CONFLITO	14		16	
37		3		6		11		9		14	CONFLITO	14		17	
38		2		3		10		11		13		12		16	
39		5		7		11		10		16	CONFLITO	12		16	
40		5		8		10		9		16	CONFLITO	12		16	
41		1		7		10		11		12	CONFLITO	12		16	
42		6		2		10		11		17		12		15	
43		7		6		11		10		15		13		16	
44		2		1		11	CONFLITO	11		16		13		15	
45		1		2		9	CONFLITO	9		16		14		17	
46		6	CONFLITO	6		9		11		16	CONFLITO	13		16	
47		6		5		10		9		12	CONFLITO	12		17	
48		6		4		9		11		17		13		15	
49		5	CONFLITO	5		9		11		12		13		16	
50		1		3		10		11		12		14		15	
51		2		7		10		9		13	CONFLITO	13		17	
52		3		8		10		9		17	CONFLITO	12		17	
53		8		2		11		9		12		14		16	
54		8		6		11	CONFLITO	11		14	CONFLITO	14		16	
55		5		4		11		9		12	CONFLITO	12		16	
56		2		3		9		11		15		12		16	

Figura 11: Conflito de recebimento versus expedição para os tanques dos sistemas 1,2 e 3 a cada instante da simulação com o algoritmo base.

V. Restrição de recebimento e expedição simultâneos em um mesmo tanque para os tanques dos sistemas 1, 2 e 3.

Para a inclusão da premissa V, foi realizada uma modificação no código do algoritmo desenvolvido, sem a necessidade de se adicionar um novo termo na função aptidão. Para tal, implementou-se uma condicional ao sorteio de tanques no momento da geração dos indivíduos. Esta condicional opera de forma que, para cada tanque sorteado como tanque

expedidor de um dado sistema, a um dado instante, caso ele tenha sido sorteado anteriormente como tanque receptor deste mesmo sistema, neste mesmo instante, um novo sorteio é realizado até que seja sorteado um tanque diferente deste. Esta formulação para o algoritmo é eficaz em todos os cenários simulados, uma vez que classifica como inviáveis indivíduos que desrespeitem esta restrição

Função aptidão

A função aptidão não sofreu alterações com a inclusão da premissa V, permanecendo a mesma da seção 4.2.1 (equação 29).

Resultados obtidos

Nas Figuras 1 e 2 do Apêndice A, pode-se observar o atendimento das premissas I e II e da premissa III, respectivamente. As premissas IV e V são atendidas em todos os casos simulados devido às modificações implementadas no algoritmo. A Figura 12 evidencia que a inclusão da restrição foi efetiva para o atendimento da premissa V, uma vez que não foram identificados conflitos de tanques recebendo e expedindo no mesmo instante da simulação. Sendo assim, uma vez atendidas todas as restrições operacionais, compreendidas pelas premissas III, IV e V, segue-se então com a inclusão das demais restrições de qualidade na próxima seção.

4.2.3 Cenário III: Inclusão das restrições de processamento de contaminantes

O cenário III considera as mesmas premissas pertencentes ao cenário II (premissas I a V), porém com a inclusão da seguinte premissa:

- VI. Restrições de limite máximo de concentração para o processamento de cada contaminante (X1 e X2).

Para a inclusão da premissa VI, foram adicionados ao algoritmo os balanços de massa por componente para cada um dos contaminantes do caso de estudo, X1 e X2, e foram acrescentados à função aptidão dois termos referentes às penalidades para extrapolações dos seus limites de processamento nas unidades. Foram adicionados os termos 4 e 5 da função aptidão, referentes a X1 e X2, respectivamente, com pesos iguais a 10^2 .

Função aptidão

$$F_{AG} = -10^3 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\max(0, (P_{min} - P_{i,j}))) + 10^{-3} \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\min(0, (P_{min} - P_{i,j}))) - 10^3 \cdot (\sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=1}^{17} (\max(0, (V_{min} - V_{i,j}))) + \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=1}^{17} (\max(0, (V_{i,j} - V_{max})))) - 10^2 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\max(0, (X1_{i,j} - X1_{max}))) - 10^2 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\max(0, (X2_{i,j} - X2_{max}))) \quad (30)$$

Resultados obtidos

Nas Figuras 3 e 4 do Apêndice A, pode-se observar o atendimento parcial das premissas I e II e o completo atendimento da premissa III, respectivamente. As premissas IV e V são atendidas em todos os casos simulados devido às modificações implementadas no algoritmo. O atendimento parcial das premissas I e II deve-se à necessidade de priorizar o enquadramento dos contaminantes X1 e X2 nos limites impostos pelas

TEMPO	DUTO 0	P1	SISTEMA 1	P2	DUTO 1	P3	SISTEMA 2	P4	DUTO 2	P5	SISTEMA 3	P6	DUTO 3	P7	DUTO 4
1		6		2		11		9		14		13		15	
2		2		1		10		9		17		12		16	
3		1		2		11		10		14		12		15	
4		4		1		9		10		14		13		15	
5		8		2		10		11		12		14		16	
6		2		1		10		9		12		14		15	
7		3		4		11		10		14		12		16	
8		1		4		9		11		14		13		17	
9		7		1		9		10		17		13		15	
10		4		2		10		9		14		13		15	
11		4		1		10		9		15		13		17	
12		5		2		9		10		15		13		17	
13		5		1		11		10		13		12		17	
14		7		3		11		10		13		12		16	
15		4		2		9		10		15		12		17	
16		8		4		9		11		13		14		16	
17		1		2		10		9		17		13		15	
18		8		4		10		9		13		14		15	
19		5		1		10		11		15		12		17	
20		1		0		11		10		12		13		16	
21		3		5		10		9		13		12		17	
22		6		0		11		10		12		13		16	
23		1		3		9		10		17		13		15	
24		4		2		10		11		14		12		17	
25		2		7		10		11		15		14		17	
26		5		8		11		10		16		12		15	
27		2		4		11		8		16		14		15	
28		4		5		11		8		12		13		17	
29		6		8		10		11		14		13		17	
30		1		4		10		11		13		14		16	
31		4		3		10		8		15		13		17	
32		6		7		9		11		14		12		16	
33		4		5		10		9		15		12		16	
34		8		6		11		9		17		12		16	
35		7		1		10		11		16		12		17	
36		5		4		9		11		12		14		16	
37		4		0		9		8		14		13		17	
38		6		4		10		9		12		13		15	
39		2		6		10		11		14		12		17	
40		7		4		11		9		12		14		16	
41		4		2		11		10		16		12		15	
42		4		7		10		9		14		13		17	
43		8		4		9		10		17		13		16	
44		1		8		11		9		16		12		15	
45		2		3		11		10		16		12		15	
46		6		3		11		8		13		14		17	
47		7		8		10		11		15		12		16	
48		2		4		9		11		16		14		15	
49		2		7		9		10		14		13		17	
50		7		8		9		11		13		12		16	
51		5		4		11		9		15		12		16	
52		4		2		9		11		13		14		15	
53		5		3		10		11		15		13		17	
54		7		3		9		10		12		14		15	
55		1		3		10		9		15		14		16	
56		3		1		11		10		17		13		16	

Figura 12: Conflito de recebimento versus expedição para os tanques dos sistemas 1, 2 e 3 a cada instante da simulação após a inclusão da premissa V.

restrições de qualidade. As Figuras 13 e 14 mostram o comportamento da concentração dos contaminantes X1 e X2, respectivamente, ao longo da simulação e evidenciam o atendimento da premissa VI, em detrimento da parafinidade de um dos seis tanques, a qual ficou abaixo de 75%. Pode-se notar também que os valores máximos de parafinidade são mais elevados em comparação com os resultados antes da implementação da premissa VI, mostrando que não só valor mínimo de parafinidade foi sacrificado, mas também a diferença em módulo do valor atribuído para o valor entregue nos tanques do sistema 3.

Apesar dos bons resultados obtidos até então, observa-se que para garantir o atendimento de todas as premissas, a resposta do modelo apresenta trocas excessivas de tanques recebedores e expedidores de cada sistema, como é mostrado na Figura 15. Nela são mostradas nas colunas os vetores correspondentes aos subconjuntos de válvulas definidos na seção 3.2.1 (P1 a P7), podendo ser visto que são raras as ocorrências de sorteios de tanques iguais para instantes de tempo subsequentes da simulação. Estas trocas excessivas de alinhamentos de tanques são operacionalmente inviáveis no sistema real, o que torna necessária a inclusão de uma nova premissa que atenda mais essa restrição operacional, a qual será tratada na próxima seção.

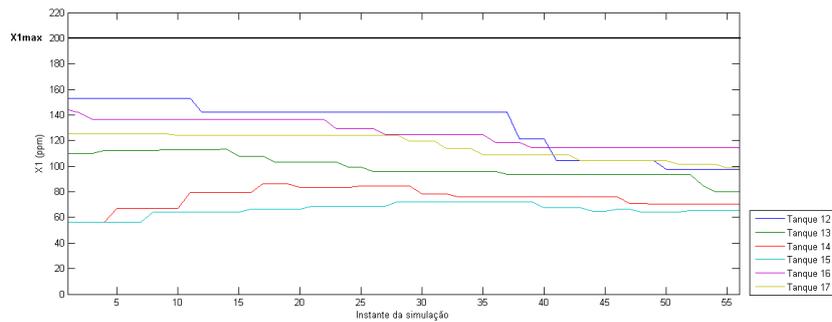


Figura 13: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação.

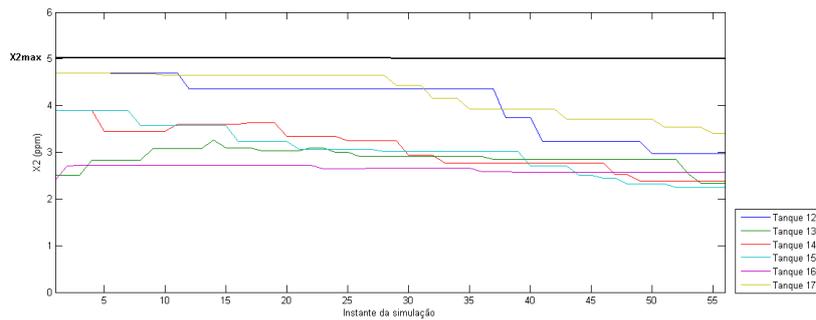


Figura 14: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação.

4.2.4 Cenário IV: Inclusão das restrições de tamanho mínimo de cota

O cenário IV considera as mesmas premissas pertencentes ao cenário III (premissas I a VI), porém com a inclusão da seguinte premissa:

- VII. Restrições de tamanho mínimo de cota de recebimento/expedição para os tanques dos sistemas 1, 2 e 3, a fim de evitar trocas excessivas de alinhamentos de tanques.

Para a inclusão da premissa VII, foi acrescentado à função aptidão um termo referente às penalidades para trocas excessivas de tanques recebedores/expedidores de cada um dos três sistemas. Ele é o sexto termo da função aptidão e é representado por “TQ”, referindo-se então ao somatório das trocas de tanque que ocorrem antes de completas 6 no recebimento dos sistemas 1, 2 e 3 e na expedição dos sistemas 1 e 2, e 12 horas na expedição do sistema 3. O peso deste termo foi definido, após uma série de testes, como sendo igual a 10.

Função aptidão

$$F_{AG} = -10^3 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\max(0, (P_{min} - P_{i,j}))) + 10^{-3} \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\min(0, (P_{min} - P_{i,j}))) - 10^3 \cdot (\sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=1}^{17} (\max(0, (V_{min} - V_{i,j}))) + \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=1}^{17} (\max(0, (V_{i,j} - V_{max})))) - 10^3 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\max(0, (X1_{i,j} - X1_{max}))) - 10^3 \cdot \sum_{i=1}^{HP} \sum_{j=12}^{17} (\max(0, (X2_{i,j} - X2_{max}))) - 10 \cdot TQ \quad (31)$$

TEMPO	DUTO 0	P1	SISTEMA 1	P2	DUTO 1	P3	SISTEMA 2	P4	DUTO 2	P5	SISTEMA 3	P6	DUTO 3	P7	DUTO 4
1		6		3		11		10		16		13		15	
2		3		2		9		11		16		12		15	
3		7		2		11		10		13		12		15	
4		3		2		9		11		14		13		16	
5		4		0		10		9		17		13		15	
6		6		1		9		9		17		13		15	
7		8		4		10		11		15		13		16	
8		7				11		10		13		12		17	
9		3		2		11		10		17		12		15	
10		4		6		11		9		14		13		17	
11		7		6		10		11		12		13		16	
12		2		7		11		0		17		13		15	
13		4		1		10		9		13		14		17	
14		7		4		11		13		13		12		16	
15		1		3		9		11		15		13		16	
16		7		4		11		9		14		13		17	
17		3		4		9		10		13		12		15	
18		8		7		11		0		17		14		15	
19		1		7		10		11		14		13		17	
20		1		3		9		10		15		12		17	
21		2		6		10		9		13		14		17	
22		4				9		11		16		14		17	
23		6		1		9		10		13		12		16	
24		7		1		10		9		14		13		17	
25		3		4		9		11		13		14		15	
26		8		5		10		9		16		14		15	
27		7		6		11		9		15		14		17	
28		2		7		10		9		17		12		16	
29		3		8		11		10		14		12		15	
30		8		2		9		0		15		12		17	
31		5		1		9		11		17		12		15	
32		7		4		10		11		14		13		17	
33		4		2		11		0		13		12		15	
34		4		2		10		11		17		14		16	
35		6		4		10		11		16		14		15	
36		5		0		11		9		13		12		17	
37		1		2		10		9		12		13		17	
38		5		0		11		9		16		13		17	
39		6		5		11		10		15		13		16	
40		4		3		11		10		12		13		15	
41		2		0		11		0		17		13		16	
42		3		1		9		11		17		13		16	
43		3		6		9		10		15		12		17	
44		3		8		10		0		12		13		16	
45		6		0		10		9		15		14		17	
46		7		0		11		10		14		12		16	
47		4		2		11		10		15		13		17	
48		3		1		10		11		14		13		16	
49		8		4		11		9		12		13		17	
50		1		3		10		9		17		13		16	
51		3		7		9		11		15		14		16	
52		2		7		9		10		13		14		15	
53		5		6		9		10		13		14		15	
54		2		1		11		9		17		13		15	
55		6		5		10		0		12		13		15	
56		8		6		11		9		12		13		15	

Figura 15: Trocas excessivas de tanque receptor/expedidor nos sistemas 1, 2 e 3.

Resultados obtidos

Nas Figuras 5 e 6 do Apêndice A, pode-se observar o atendimento das premissas I e II e da premissa III, respectivamente. As premissas IV e V são atendidas em todos os casos simulados devido às modificações implementadas no modelo. As Figuras 7 e 8 do Apêndice A mostram a concentração de X1 e X2 ao longo da simulação e o atendimento da premissa VI. Já a Figura 16 mostra o comportamento dos tanques receptores/expedidores ao longo da simulação após a inclusão da premissa VII, podendo-se concluir a partir dela que a premissa é atendida e a penalidade da função aptidão, com peso igual a 10, tem efeito sobre a distribuição dos tanques na programação. No entanto, para a obtenção deste resultado, foi necessário alterar os pesos dos termos 4 e 5 da função aptidão, os quais estão relacionados aos contaminantes X1 e X2, para 10^3 . Desta forma, as restrições de limite máximo de concentração para ambos os contaminantes permanecem sendo atendidas, mesmo com a inclusão da premissa VII.

4.3 Avaliação do modelo final obtido para diferentes cenários de programação

Com base no algoritmo final obtido após a realização dos testes da seção 4.1, nesta seção será avaliada a resposta do modelo para três cenários com graus de dificuldade distintos. Os três cenários considerados apresentam os mesmos valores de volume e composição iniciais para todos os tanques dos sistemas 1, 2 e 3. A diferença entre eles consiste no grau de contaminação dos navios que são descarregados ao longo da simulação, conforme apresentado na Tabela 1 do Apêndice B, iniciando pelo cenário com

menor teor de contaminantes (cenário I) até o cenário de maior teor de contaminantes (cenário III).

TEMPO	DUTO 0	P1	SISTEMA 1	P2	DUTO 1	P3	SISTEMA 2	P4	DUTO 2	P5	SISTEMA 3	P6	DUTO 3	P7	DUTO 4
1		3		1		10		11		15		13		16	
2		6		2		10		9		14		12		15	
3		8		1		10		11		13		12		16	
4		5		3		9		10		14		12		17	
5		2		5		11		10		16		17		17	
6		5		1		11		9		14		12		17	
7		3		2		9		10		17		14		16	
8		4		9		11		11		13		12		16	
9		3		2		11		9		17		12		16	
10		6		0		9		11		16		12		17	
11		2		6		9		10		15		13		17	
12		4		1		11		10		12		14		17	
13		3		5		11		10		17		13		15	
14		1		2		9		11		12		13		15	
15		6		4		10		11		12		14		15	
16		4		3		10		9		17		13		16	
17		5		0		11		10		14		12		16	
18		1		5		10		9		13		12		16	
19		7		6		9		10		17		12		16	
20		8		1		11		9		14		13		15	
21		3		0		11		10		17		13		15	
22		4		3		9		11		12		14		15	
23		3		2		9		11		17		13		16	
24		2		4		10		9		12		14		15	
25		4		3		11		0		14		12		15	
26		8		2		10		9		14		12		15	
27		3		1		10		9		17		12		16	
28		6		8		9		11		12		13		15	
29		8		2		10		0		14		13		16	
30		7		8		11		10		14		13		15	
31		2		5		9		11		14		12		15	
32		6		0		10		11		15		14		17	
33		8		2		10		11		13		14		17	
34		7		6		11		10		14		13		15	
35		3		0		9		10		12		13		17	
36		2		0		11		9		13		12		17	
37		6		3		10		0		13		12		16	
38		2		3		11		9		16		13		17	
39		1		5		9		10		16		13		17	
40		8		2		9		10		15		12		16	
41		2		6		10		9		12		14		15	
42		6		0		10		11		16		14		17	
43		6		3		10		9		16		14		15	
44		2		3		10		9		13		14		16	
45		2		1		11		0		12		14		15	
46		6		5		9		10		14		12		17	
47		3		0		9		11		15		14		17	
48		8		2		9		10		16		14		15	
49		3		7		9		10		14		12		15	
50		5		1		10		0		16		14		17	
51		6		4		11		9		15		12		17	
52		4		6		11		0		12		14		16	
53		1		8		11		9		13		12		17	
54		6		5		9		11		13		14		17	
55		1		4		11		9		16		14		17	
56		1		6		10		9		13		12		16	

Figura 16: Trocas de tanque receptor/expedidor nos sistemas 1, 2 e 3 após a inclusão da premissa VII.

4.3.1 Cenário I: Blending de parafinidade

O cenário I consiste na otimização do *scheduling* de recebimento de matéria-prima considerando apenas o desafio de *blending* do parâmetro parafinidade (P), uma vez que os lotes recebidos neste cenário apresentam baixo teor dos contaminantes X1 e X2. As Figuras 17, 18 e 19 apresentam o comportamento dos três componentes da nafta (P, X1 e X2) ao longo da simulação do cenário I. Pode-se concluir a partir delas que as premissas para a parafinidade são atendidas para os seis tanques do sistema 3, uma vez que os contaminantes X1 e X2 não conferem penalidades à função aptidão por estarem dentro dos limites de especificação nos três lotes de nafta recebidos.

4.3.2 Cenário II: Blending de parafinidade e X1

O cenário II consiste na otimização do *scheduling* de recebimento de matéria-prima considerando o desafio de *blending* do parâmetro parafinidade (P) e do contaminante X1, uma vez que os lotes recebidos neste cenário apresentam baixo teor do contaminante X2. As Figuras 20, 21 e 22 apresentam o comportamento dos três componentes da nafta (P, X1 e X2) ao longo da simulação do cenário II. Pode-se concluir a partir delas que as premissas para a parafinidade são atendidas para todos os seis tanques do sistema 3, uma vez que

o contaminante X2 não confere penalidades à função aptidão, por estar dentro dos limites de especificação nos três lotes de nafta recebidos, e o *blending* do contaminante X1 para enquadramento no seu limite de processamento não apresenta grandes impactos à estratégia de otimização da parafinicidade.

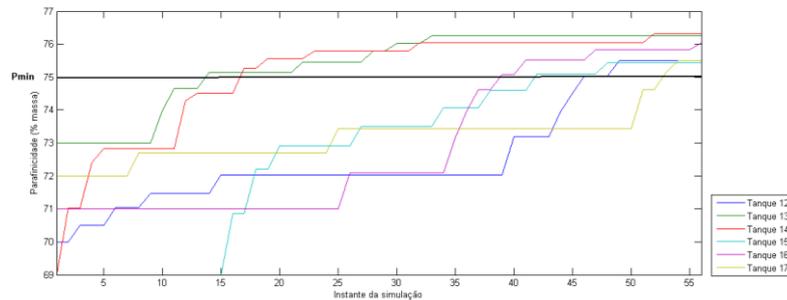


Figura 17: Parafinicidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário I.

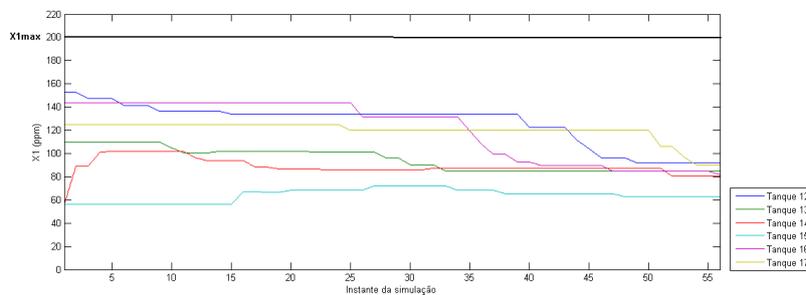


Figura 18: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário I.

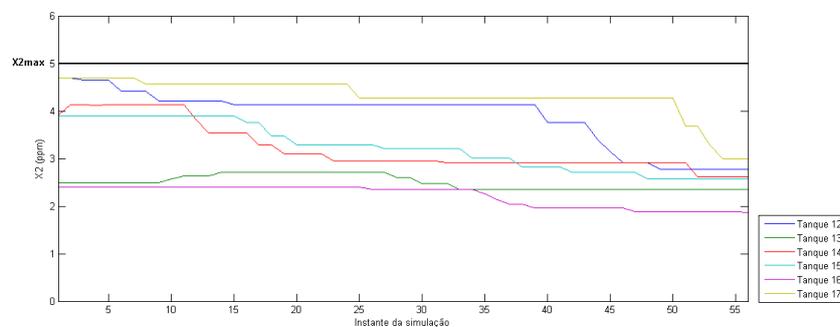


Figura 19: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário I.

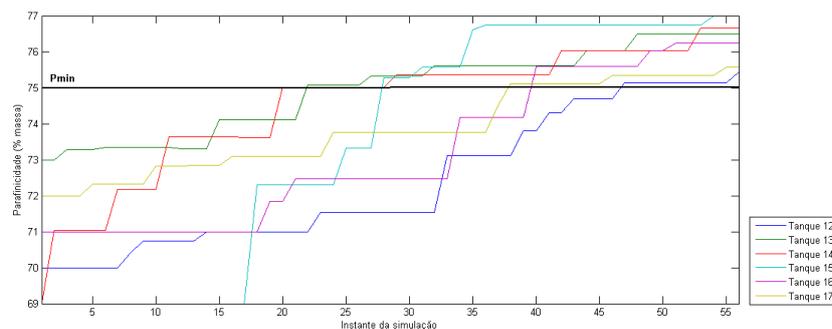


Figura 20: Parafinicidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário II.

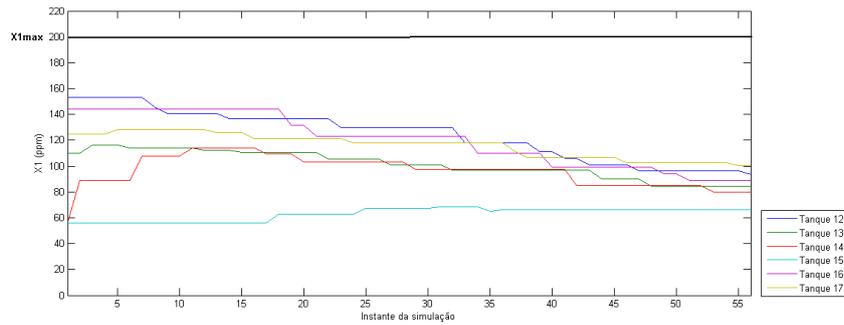


Figura 21: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário II.

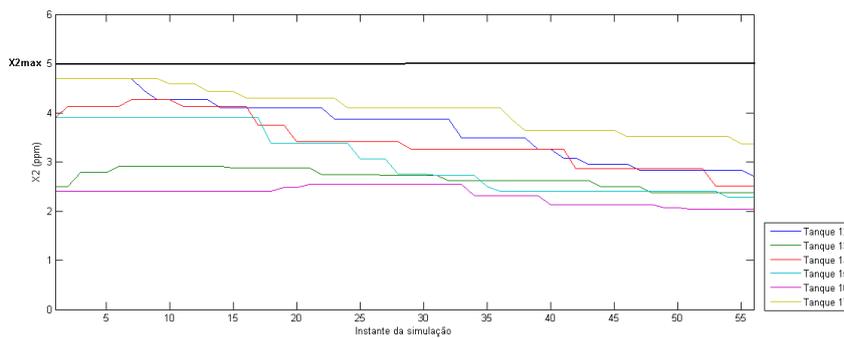


Figura 22: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário II.

4.3.3 Cenário III: Blending de parafinidade, X1 e X2

O cenário III consiste na otimização do *scheduling* de recebimento de matéria-prima considerando o desafio de *blending* do parâmetro parafinidade (P), do contaminante X1, e do contaminante X2 simultaneamente, uma vez que alguns lotes recebidos neste cenário apresentam elevado teor dos contaminante X1 e X2. As Figuras 23, 24 e 25 apresentam o comportamento dos três componentes da nafta (P, X1 e X2) ao longo da simulação do cenário III. Pode-se concluir a partir delas que a restrição de parafinidade mínima é atendida apenas para quatro tanques do sistema 3, uma vez que os contaminantes X1 e X2 conferem penalidades à função aptidão por estarem fora dos limites de especificação nos lotes de nafta recebidos necessitarem de prioridade nas operações de *blending*. Pode-se constatar a partir das Figuras 32 e 33 que o sacrifício do valor de parafinidade mínima para os dois tanques do sistema 3 foi efetivo e garantiu o enquadramento de X1 e X2 nos limites do processo, mantendo-os abaixo do limite máximo durante toda a simulação.

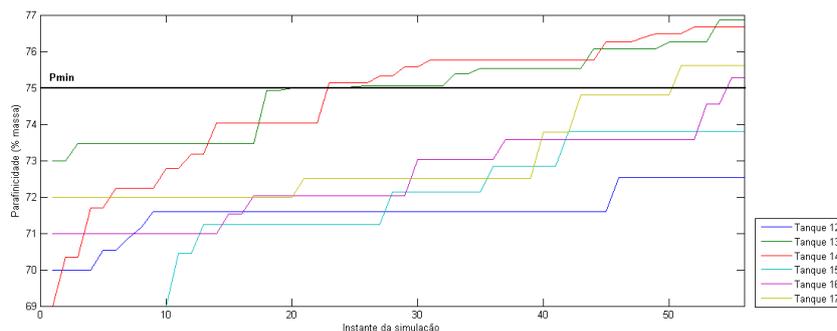


Figura 23: Parafinidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário III.

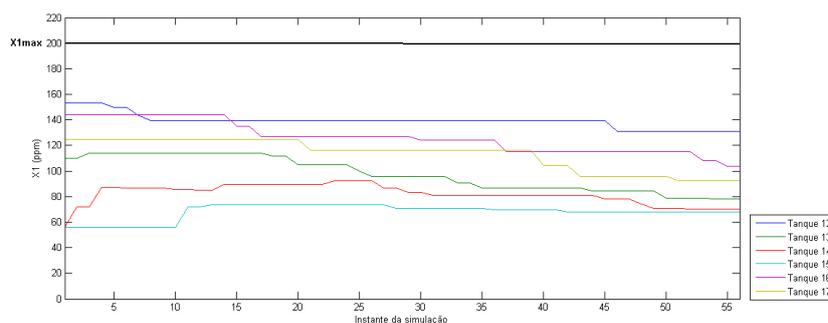


Figura 24: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário III.

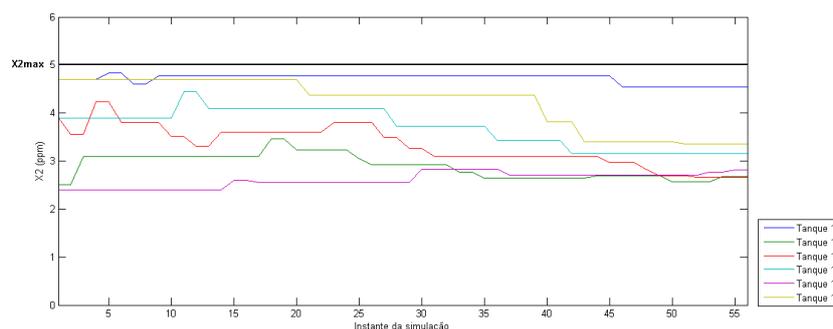


Figura 25: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação do cenário III.

4.4 Comparação da resposta do modelo com uma programação real

Comparando a solução obtida pelo algoritmo genético com a solução apresentada por um especialista *ad hoc* para um dado cenário de programação, obteve-se a Tabela 1. Através dos dados apresentados nela, pode-se concluir que a média de parafinidade entregue pelo modelo às unidades foi de 73,09% enquanto que a média entregue através da programação realizada por um especialista foi 72,11%. Já para o teor de contaminantes, pode-se observar que foi mais elevado na programação realizada pelo especialista em comparação com a programação proposta pelo modelo. Pode-se concluir então que a utilização da ferramenta permite com que se melhore a qualidade da mistura entregue para processamento nas plantas, através da entrega de um perfil mais constante de qualidade, contendo o máximo possível de parafinidade e o mínimo possível de contaminantes.

Tabela 2: Composição média da nafta entregue nos tanques do sistema 3 ao longo do horizonte de programação.

Programação	Parafinidade Média (% massa)	Concentração Média de X1 (ppm)	Concentração Média de X2 (ppm)
Realizada pelo especialista	72,11	116,86	3,73
Proposta pelo modelo	73,09	104,36	3,57

5 Conclusões e Trabalhos Futuros

Como resultado deste trabalho, solucionou-se um problema de otimização de *scheduling* de nafta aplicável a uma indústria petroquímica de primeira geração. A resposta do modelo é uma programação para o sistema de abastecimento de nafta que considera simultaneamente o problema de transporte e o problema de gerenciamento da qualidade da matéria-prima. Ao resolver o problema, são determinadas as quantidades ótimas de nafta a serem misturadas de forma a obter o perfil de qualidade desejado, em termos de rendimento, nos tanques de carga das unidades. Além disso, a programação de operação ideal obtida satisfaz as restrições operacionais, de balanço de massa e de qualidade existentes no caso de estudo.

Conclui-se então que a ferramenta desenvolvida tem potencial de aplicação para a realização da programação de recebimento de nafta, uma vez que o modelo obtido atende as principais restrições do caso de estudo e mostra-se eficiente na resolução do problema de otimização de *scheduling* de nafta. Além disso, com base na determinação adequada dos pesos para os termos da função aptidão do algoritmo genético, o modelo apresentou aderência à estratégia de *blending* de matéria-prima adotada pela empresa, como pôde ser visto na Tabela 2.

A maior parte dos trabalhos existentes na literatura concentrou-se no gerenciamento dos tanques de armazenagem sem considerar as operações de *blending*, que são ferramentas estratégicas das áreas de planejamento, compra e programação de matérias-primas para a indústria petroquímica de primeira geração, a qual apresenta o custo da matéria-prima como fator dominante sobre o custo total de produção. Neste contexto, ferramentas de otimização como a proposta neste trabalho têm potencial para serem utilizadas como apoio nas decisões de compra de matérias-primas, uma vez que podem ser aplicadas não somente para a definição do *scheduling* das cargas já compradas, mas também como ferramenta de análise de viabilidade de cenários de *blending*, oferecendo oportunidades de economia no custo da matéria-prima.

Assim, espera-se que o modelo proposto forneça mais *insights* para o desenvolvimento de trabalhos visando a redução de custos e o consequente aumento dos lucros da indústria petroquímica, através da implementação da otimização matemática às decisões relacionadas às áreas de matérias-primas ou às demais áreas com potencial de agregação de valor às empresas. Como sugestões para trabalho futuros, pode-se destacar o aprimoramento do modelo obtido através da inclusão de premissas como: restrições de qualidade diferentes para cada planta da unidade modelada; tempo morto aos balanços de massa dos dutos do sistema, devido à lacuna de tempo entre o momento de entrada de um produto nos dutos e o momento de sua saída na outra extremidade, o que é resultante da grande extensão dos dutos do sistema estudado; e a existência de dois tipos de produtos não-misturáveis, viabilizando a utilização da ferramenta para cenários de operação com dois tipos de matérias-primas distintos, como nafta e condensado petroquímico.

Além disso, propõe-se o desenvolvimento de uma máscara em Excel a fim de facilitar a alimentação dos *inputs* necessários para a rodada do modelo, de forma a reduzir ainda mais o tempo despendido com a tarefa de confecção da programação de nafta. Ainda, sugere-se a realização de uma sequência de testes para avaliação do número de gerações e do tamanho das populações ideais para a rodada do modelo proposto, de maneira a obter os menores tempos de simulação aliado às respostas com melhores aptidões.

Referências

ASPEN TECHNOLOGY. Aspen PIMS. [s. l.], [s.d.].

BARBOZA, Angela Olandoski et al. Programação linear inteira mista e algoritmo genético aplicados ao problema de transferência e estocagem de produtos em uma indústria petrolífera. *Sistemas & Gestão*, [s. l.], v. 10, n. 4, p. 561–574, 2015.

BAUMGARTNER, Arthur J. et al. Feedstock Contaminants in Ethylene Plants - an Update. Spring AIChE National Meeting, New Orleans, LA, 2004.

CASTILLO-CASTILLO, Pedro A.; CASTRO, Pedro M.; MAHALEC, Vladimir. Global Optimization of Nonlinear Blend-Scheduling Problems. *Engineering*, [s. l.], v. 3, n. 2, p. 188–201, 2017.

CASTILLO-CASTILLO, Pedro A.; MAHALEC, Vladimir. Improved continuous-time model for gasoline blend scheduling. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 84, p. 627–646, 2016.

CASTRO, Pedro M.; HARJUNKOSKI, Iiro; GROSSMANN, Ignacio E. New continuous-time scheduling formulation for continuous plants under variable electricity cost. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, [s. l.], v. 48, n. 14, p. 6701–6714, 2009.

CHAUDHURI, Uttam Ray. *Fundamentals of Petroleum and Petrochemical Engineering*. [s.l.: s.n.].

CHEN, Chang Ling et al. Optimal short-term scheduling of multiproduct single-stage batch plants with parallel lines. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, [s. l.], v. 41, n. 5, p. 1249–1260, 2002.

CHEN, Xiao; WANG, Ning. Optimization of short-time gasoline blending scheduling problem with a DNA based hybrid genetic algorithm. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, [s. l.], v. 49, n. 10, p. 1076–1083, 2010.

EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. *Optimization of Chemical Processes*. Second Ed. ed. New York, NY: McGraw-Hill, 2001.

FLOUDAS, Christodoulos A.; LIN, Xiaoxia. Continuous-time versus discrete-time approaches for scheduling of chemical processes: a review. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 28, n. 11, p. 2109–2129, 2004.

GANJI, H. et al. Determination of Suitable Feedstock for Refineries Utilizing LP and NLP Models. *International Journal of Chemical Engineering and Applications*, [s. l.], v. 1, n. 3, p. 225–229, 2013.

GOLDBERG, David E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. [s.l.] : Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1989.

HARJUNKOSKI, Iiro et al. Scope for industrial applications of production scheduling models and solution methods. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 62, p. 161–193, 2014.

HASSAN, M. K.; KANDEIL, A.; ELKHAYAT, A. Improving oil refinery productivity through enhanced crude blending using linear programming modeling. *Asian Journal of Scientific Research*, 2011.

HE, Yaohua; HUI, Chi-Wai. Genetic algorithm based on heuristic rules for high-constrained large-size single-stage multi-product scheduling with parallel units. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, [s. l.], v. 46, n. 11, p. 1175–1191, 2007.

HOLLAND, J. H. *Genetic Algorithms*. [s.l.] : Scientific American, 1992.

HONEYWELL PROCESS SOLUTIONS. *Symphonite Refining and Petrochemical Modeling System (RPMS)*. [s. l.], [s.d.].

JAUHAR, Sunil Kumar; PANT, Millie. Genetic algorithms in supply chain management: A critical analysis of the literature. *Sadhana - Academy Proceedings in Engineering Sciences*, [s. l.], v. 41, n. 9, p. 993–1017, 2016.

JIA, Zhenya; IERAPETRITOU, Marianthi; KELLY, Jeffrey D. Refinery short-term scheduling using continuous time formulation: Crude-oil operations. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, [s. l.], v. 42, n. 13, p. 3085–3097, 2003.

JOLY, M. Refinery production planning and scheduling: The refining core business. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, [s. l.], v. 29, n. 2, p. 371–384, 2012.

JOLY, M.; MORO, L. F. L.; PINTO, J. M. Planning and scheduling for petroleum refineries using mathematical programming. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, [s. l.], v. 19, n. 2, p. 207–228, 2002.

JOSEPH, Niju P. Uncertainty Management of Supply Chain Manufacturing Cost using Genetic Algorithm. [s. l.], v. 14, n. 3, p. 678–683, 2019.

KALLRATH, J. Planning and scheduling in the process industry. *Advanced planning and scheduling solutions in process industry*, [s. l.], p. 11, 2003.

KARUPPIAH, Ramkumar; FURMAN, Kevin C.; GROSSMANN, Ignacio E. Global optimization for scheduling refinery crude oil operations. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 32, n. 11, p. 2745–2766, 2008.

KELLY, Jeffrey; MANN, J. L. Crude oil blend scheduling optimization: an application with multimillion dollar benefits - Part 1 - The ability to schedule the crude oil blendshop more effectively provides substantial downstream benefits. *Hydrocarbon Processing*, [s. l.], v. 82, 2003. a.

KELLY, Jeffrey; MANN, J. L. Crude oil blend scheduling optimization: an application with multimillion dollar benefits - Part 2 - The ability to schedule the crude oil blendshop more effectively provides substantial downstream benefits. *Hydrocarbon Process.*, [s. l.], v. 82, 2003. b.

KHOSLA, Dinesh K.; GUPTA, Santosh K.; SARAF, Deoki N. Multi-objective optimization of fuel oil blending using the jumping gene adaptation of genetic algorithm. *Fuel Processing Technology*, [s. l.], v. 88, n. 1, p. 51–63, 2007.

KUO, Tung Hsiung; CHANG, Chuei Tin. Application of a mathematic programming model for integrated planning and scheduling of petroleum supply networks. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, [s. l.], v. 47, n. 6, p. 1935–1954, 2008.

LEE, Heeman et al. Mixed-integer linear programming model for refinery short-term scheduling of crude oil unloading with inventory management. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, [s. l.], v. 35, n. 5, p. 1630–1641, 1996.

LEE, Hojae; MARAVELIAS, Christos T. Discrete-time mixed-integer programming models for short-term scheduling in multipurpose environments. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 107, p. 171–183, 2017.

LEE, Hojae; MARAVELIAS, Christos T. Combining the advantages of discrete and continuous-time scheduling models: Part 2. Systematic methods for determining model parameters. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], 2018. a.

LEE, Hojae; MARAVELIAS, Christos T. Combining the advantages of discrete and continuous-time scheduling models: Part 1. Framework and mathematical formulations. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 116, p. 176–190, 2018. b.

LEE, Taeyeong et al. A synchronized feed scheduling of petrochemical industries simultaneously considering vessel scheduling and storage tank management. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, [s. l.], v. 48, n. 5, p. 2721–2727, 2009.

LEE, Taeyeong et al. A study on scheduling of naphtha transportation and storage systems for naphtha cracking center. *Chemical Engineering Research and Design*, [s. l.], v. 88, n. 2, p. 189–196, 2010.

MARAVELIAS, Christos. General framework and modeling approach classification for chemical production scheduling. *AIChE Journal*, [s. l.], v. 58, p. 1812–1828, 2012.

MARAVELIAS, Christos T. Mixed-Time Representation for State-Task Network Models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, [s. l.], v. 44, n. 24, p. 9129–9145, 2005.

MARAVELIAS, Christos T.; GROSSMANN, Ignacio E. New General Continuous-Time State-Task Network Formulation for Short-Term Scheduling of Multipurpose Batch Plants. *Ind. Eng. Chem. Res.*, [s. l.], v. 42, p. 3056–3074, 2003.

MARTIN, Clarence H. A hybrid genetic algorithm/mathematical programming approach to the multi-family flowshop scheduling problem with lot streaming. *Omega*, [s. l.], v. 37, n. 1, p. 126–137, 2009.

MÁS, Rodrigo; PINTO, Jose. A Mixed-Integer Optimization Strategy for Oil Supply in Distribution Complexes. [s.l: s.n.]. v. 4

MEIRELLES, L. B.; SILVA, S. M. C. Da; RAJAGOPAL, K. Caracterização da nafta petroquímica para a produção de aromáticos. [s. l.], p. 13879–13885, 2015.

MEIRELLES, Livia. Caracterização da nafta petroquímica para produção de aromáticos. [s. l.], p. 141, 2014.

MÉNDEZ, Carlos A. et al. A simultaneous optimization approach for off-line blending and scheduling of oil-refinery operations. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 30, n. 4, p. 614–634, 2006.

MERCHAN, Andres F.; LEE, Hojae; MARAVELIAS, Christos T. Discrete-time mixed-integer programming models and solution methods for production scheduling in multistage facilities. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 94, p. 387–410, 2016.

NEIRO, Sérgio M. S.; PINTO, José M. A general modeling framework for the operational planning of petroleum supply chains. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 28, n. 6–7, p. 871–896, 2004.

NIE, Y., BIEGLER, L.T., VILLA, C.M., WASSICK, J. M. Discrete time formulation for the integration of scheduling and dynamic optimization. *Ind. Eng. Chem. Res.*, [s. l.], v. 54, p. 4303–4315, 2015.

OLIVEIRA, F.; HAMACHER, S.; ALMEIDA, M. R. Process industry scheduling optimization using genetic algorithm and mathematical programming. *Journal of Intelligent Manufacturing*, [s. l.], v. 22, n. 5, p. 801–813, 2011.

OTA, Y. et al. Optimization of naphtha feedstock blending for integrated olefins-aromatics plant production scheduling. [s.l.] : Elsevier Masson SAS, 2002. v. 10

PUROHIT, Amit; SURYAWANSHI, Tukaram. Integrated product blending optimization for oil refinery operations. [s.l.] : IFAC, 2013. v. 10

REDDY, P. Chandra Prakash; KARIMI, I. A.; SRINIVASAN, R. Novel solution approach for optimizing crude oil operations. *AIChE Journal*, [s. l.], v. 50, n. 6, p. 1177–1197, 2004. a.

REDDY, P. Chandra Prakash; KARIMI, I. A.; SRINIVASAN, R. A new continuous-time formulation for scheduling crude oil operations. *Chemical Engineering Science*, [s. l.], v. 59, n. 6, p. 1325–1341, 2004. b.

REID, J. A.; MCPHAUL, D. R. Control contaminants in olefin feedstocks and products. *Hydrocarbon Processing*, [s. l.], p. 128–136, 1996.

REJOWSKI, R.; PINTO, J. M. A novel continuous time representation for the scheduling of pipeline systems with pumping yield rate constraints. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 32, n. 4–5, p. 1042–1066, 2008.

RISBECK, Michael J. et al. Mixed-integer optimization methods for online scheduling in large-scale HVAC systems. *Optimization Letters*, [s. l.], 2019.

SHAIK, Munawar A. et al. Production scheduling of a large-scale industrial continuous plant: Short-term and medium-term scheduling. *Computers and Chemical Engineering*, [s. l.], v. 33, n. 3, p. 670–686, 2009.

SIMAO, Leonardo M.; DIAS, Douglas; PACHECO, Marco. Refinery Scheduling Optimization using Genetic Algorithms and Cooperative Coevolution. [s. l.], p. 151–158, 2007.

SOARES, André Almeida. Modelagem geral para programação de misturas de derivados de petróleo. [s. l.], 2009.

TAGOE, C;; RAMHANY, W. Are there contaminants in your feedstream? Hydrocarbon Processing, [s. l.], 1993.

TORRES, Eduardo Mc Mannis. A evolução da indústria petroquímica brasileira. Química Nova, [s. l.], v. 20, p. 49–54, 1997.

VELEZ, Sara; DONG, Yachao; MARAVELIAS, Christos T. Changeover formulations for discrete-time mixed-integer programming scheduling models. European Journal of Operational Research, [s. l.], v. 260, n. 3, p. 949–963, 2017.

VELEZ, Sara; MARAVELIAS, Christos T. Multiple and nonuniform time grids in discrete-time MIP models for chemical production scheduling. Computers & Chemical Engineering, [s. l.], v. 53, p. 70–85, 2013.

VELEZ, Sara; MARAVELIAS, Christos T. Advances in Mixed-Integer Programming Methods for Chemical Production Scheduling. Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering, [s. l.], v. 5, n. 1, p. 97–121, 2014.

VELEZ, Sara; MARAVELIAS, Christos T. Theoretical framework for formulating MIP scheduling models with multiple and non-uniform discrete-time grids. Computers and Chemical Engineering, [s. l.], v. 72, p. 233–254, 2015.

VERDERAME, Peter M. et al. Planning and scheduling under uncertainty: A review across multiple sectors. Industrial and Engineering Chemistry Research, [s. l.], v. 49, n. 9, p. 3993–4017, 2010.

WANG, Zihao; FENG, Yiping; RONG, Gang. Synchronized scheduling approach of ethylene plant production and naphtha oil inventory management. Industrial and Engineering Chemistry Research, [s. l.], v. 53, n. 15, p. 6477–6499, 2014.

WESTERLUND, Joakim et al. Mixed-Time Mixed-Integer Linear Programming Scheduling Model. Industrial & Engineering Chemistry Research, [s. l.], v. 46, n. 9, p. 2781–2796, 2007.

ZHOU, Zhangyu; CHENG, Siwei; HUA, Ben. Supply chain optimization of continuous process industries with sustainability considerations. Computers & Chemical Engineering, [s. l.], v. 24, p. 1151–1158, 2000.

ZIMMER, Tomás Henrique. Alocação de matérias-primas em indústria multiplanta, 2011.

ZIMMERMANN, HEINZ; WALZL, ROLAND. Ethylene. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, [s. l.], p. 547–572, 2012.

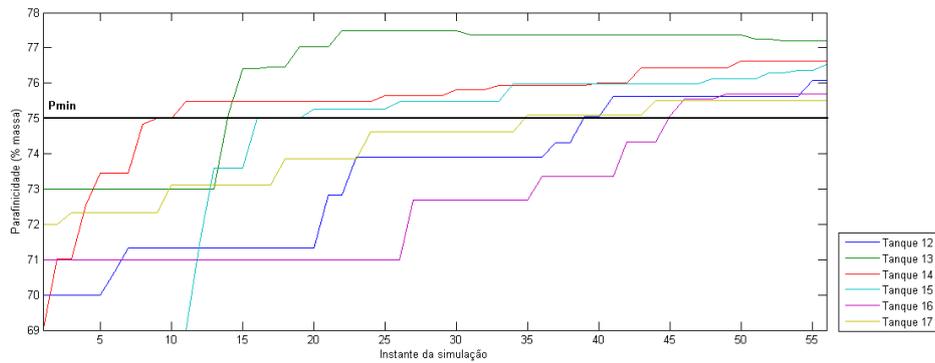
APÊNDICE A – Gráficos das simulações da seção 4.2

Figura 1: Parafinidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação após a inclusão da premissa V.

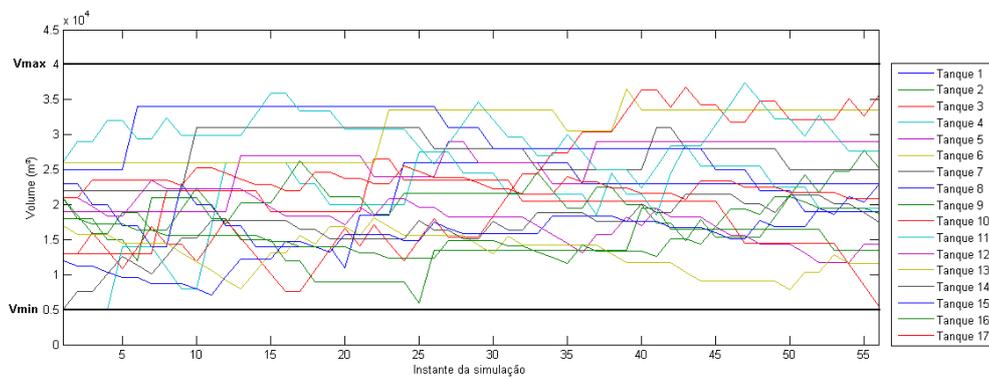


Figura 2: Volume dos tanques dos sistemas 1, 2 e 3 ao longo da simulação após a inclusão da premissa V.

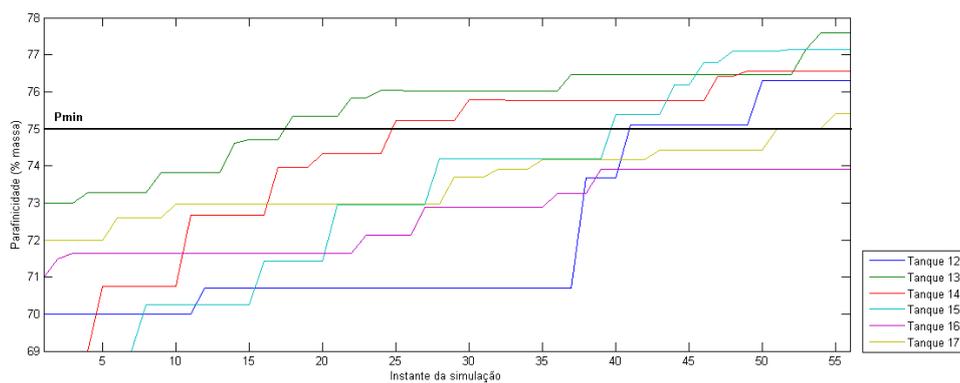


Figura 3: Parafinidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação após a inclusão da premissa VI.

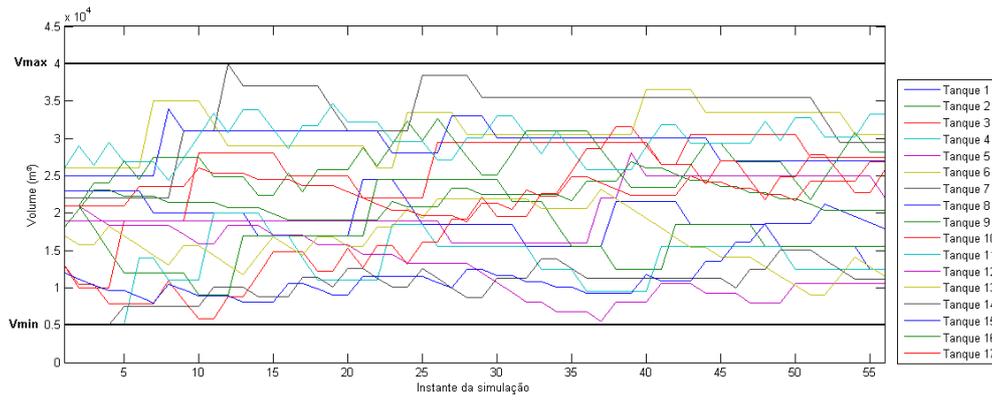


Figura 4: Volume dos tanques dos sistemas 1, 2 e 3 ao longo da simulação após a inclusão da premissa VI.

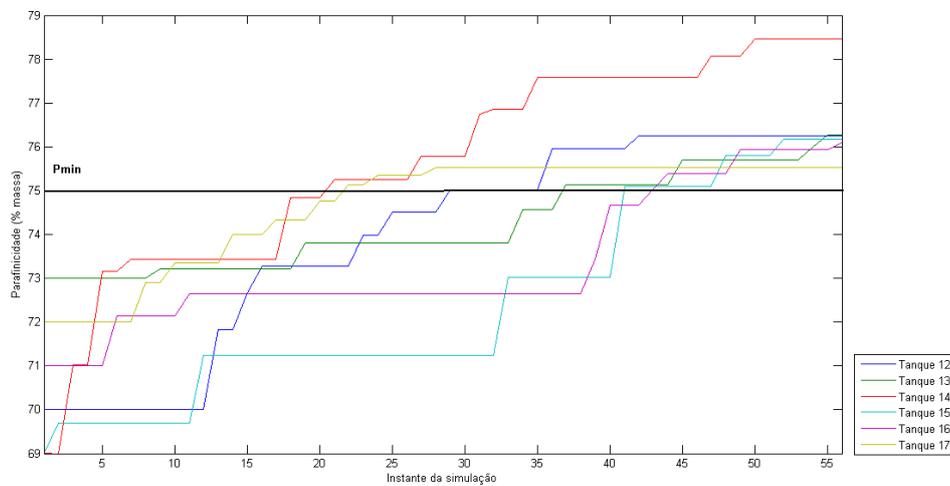


Figura 5: Parafinidade dos tanques do sistema 3 ao longo da simulação após a inclusão da premissa VII.

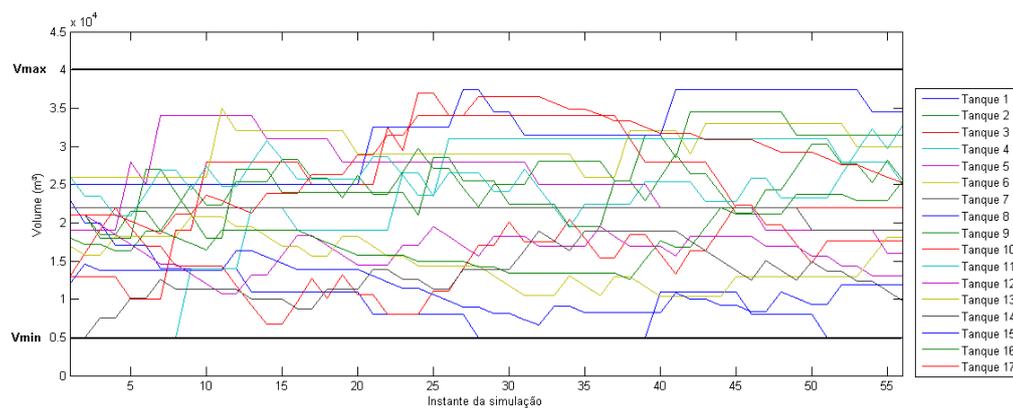


Figura 6: Volume dos tanques dos sistemas 1, 2 e 3 ao longo da simulação após a inclusão da premissa VII.

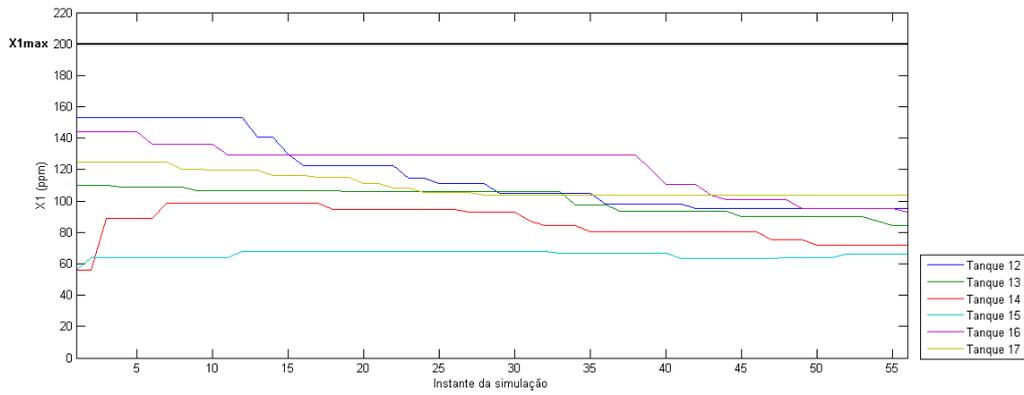


Figura 7: Concentração de X1 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação após a inclusão da premissa VII.

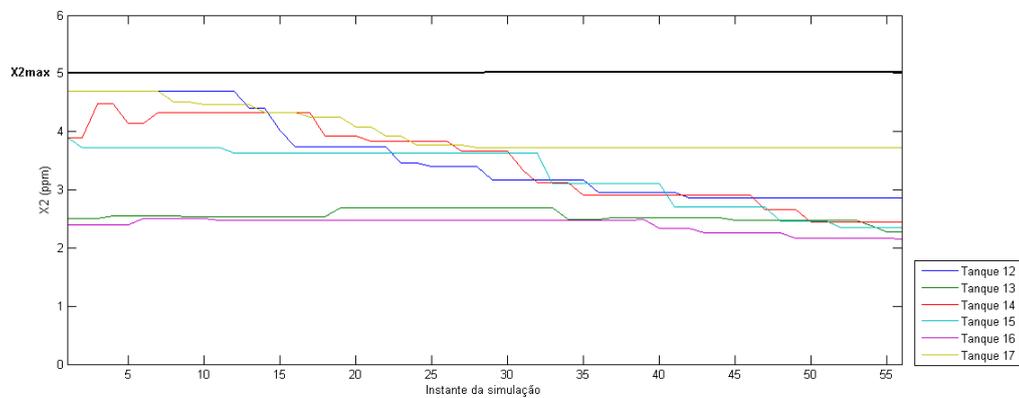


Figura 8: Concentração de X2 nos tanques do sistema 3 ao longo da simulação após a inclusão da premissa VII.

APÊNDICE B – Informações dos navios das simulações da seção 4.3

Tabela 1: Qualidades dos navios descarregados nos cenários I, II e III.

Cenário	Navio	Parafinicidade (% massa)	Concentração de X1 (ppm)	Concentração de X2 (ppm)
I	1	83	75	1,5
	2	82	10	0,5
	3	73	50	1
II	1	83	75	1,5
	2	82	10	0,5
	3	73	250	1
III	1	83	75	1,5
	2	82	10	0,5
	3	73	250	19