



APLICAÇÃO DE SUBCONJUNTO EXTERNAMENTE ESTÁVEL DE GRAFO COM NÓS VALORADOS ACOPLADO À FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL PARA COBERTURA DE ÁREA EM CASO DE VAZAMENTO ACIDENTAL DE GÁS

HENDREW DE SOUZA GIROTTO ¹, SÁVIO S. V. VIANNA ²

1, 2 - Universidade Estadual de Campinas, hendrewgirotto@gmail.com

1 Resumo

Foi estudado uma forma para a otimização da alocação de detectores de gás em uma indústria química. A solução proposta foi a aplicação de grafos valorados combinados com fluidodinâmica computacional (CFD) para se encontrar o número mínimo de detectores e suas localizações em uma área de processo. Os pesos dos nós do grafo devem ser calculados com base na frequência de vazamento. A configuração ótima da distribuição de detectores de gás é avaliada com base na simulação de dispersão de gás usando técnicas de CFD. Foi encontrado que os pesos 1 (baixa frequência de vazamento de gás), 2 (média frequência de vazamento de gás) e 3 (alta frequência de vazamento de gás) satisfazem o problema de otimização, uma vez que se foi obtido 100% de cobertura das áreas com a utilização desse conjunto de pesos. Foi possível detectar o vazamento de amônia em 5 s utilizando o conjunto de pesos estabelecido, o que mostrou-se 12 s mais rápido quando se comparado ao caso sem pesos nos nós do subconjunto externamente estável de Grafo.

Palavras-chave: otimização, grafos, mecânica dos fluidos computacional.

2 Introdução e justificativa

O problema da cobertura de área tem inúmeras aplicações na engenharia, entre elas tem-se a alocação de detectores de gás em plantas de processos químicos. Um dos primeiros estudos sobre a alocação dos detectores de gás foi proposto por Vianna e Ferreira (Vianna e Ferreira Filho, 2004). As simulações de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) foram feitas usando FLACS (*Flame Acceleration Simulador*) e o problema de otimização foi resolvido pelo código desenvolvido para problemas de otimização 0-1 (Vianna, 2004. Vianna 2019).

Mais recentemente, Vianna (Vianna, 2019) conduziu um trabalho sobre o problema de cobertura na otimização da alocação de detectores de gás em indústrias químicas. Pela formulação do problema de cobertura, observou-se que o número de simulações CFD pode ser reduzido significativamente. Ademais, também foi possível otimizar a rede de dispositivos levando em consideração que a área estudada deveria ser 100% abrangida por eles. Um algoritmo proposto por Vianna (Vianna 2019) foi capaz de criar a matriz adjacente do grafo $G = (X, V)$ que representa a área a ser protegida pelos detectores. Tal algoritmo foi combinado com a abordagem de Balas para o problema de cobertura. Então, o número mínimo de detectores e suas localizações em uma planta química passou a ser fornecido pelo algoritmo desenvolvido por Vianna.

Este projeto analisou o mesmo problema, porém, agora, levando em consideração o efeito de nós valorados do grafo de cobertura. Visto que em uma planta de processos químicos, a probabilidade de se ocorrer um vazamento de gás não é a mesma em toda sua extensão. Fatores como a quantidade de tubulações, de flanges e de maquinários devem ser levados em consideração para a alocação dos detectores de gases. Por conta disto, o problema aqui tratado possui nós com pesos diferentes do grafo em análise.

3 Material e métodos

A metodologia do projeto está dividida em duas partes: avaliação do peso nos nós do grafo e modelagem numérica de escoamento de fluidos para otimização e cobertura.

3.1 Optimi - Uma ferramenta computacional

Inicialmente foi necessário a familiarização com o software Optimi desenvolvido pela Unicamp. Para tanto, uma área quadrangular foi selecionada como área de otimização, que foi dividida em sub-áreas. Cada sub-área corresponde ao nó do grafo $G = (X, V)$ em que o conjunto X é o conjunto de sub-áreas e o conjunto V é o conjunto das arestas que conectam cada nó de acordo com a restrição de cobertura. Foram então, realizados testes para checar o poder de cobertura do programa em diferentes malhas 2D.



Então, foram introduzidos os pesos e mais testes foram realizados para verificar se o programa continuava a cobrir toda a área e como os pesos afetavam a distribuição dos detectores de gás. Foi criado um arquivo de texto *w.dat* no qual o usuário deve escrever em coluna o peso que será atribuído a cada sub-área, de forma que o número digitado na linha *i* seja o peso da sub-área *i*. Quatro conjunto de pesos diferentes foram propostos, eles foram 1, 2 e 3; 1, 2 e 4; 1, 5 e 25; 1, 10 e 100 de tal forma que o peso 1 foi utilizado para áreas com baixa probabilidade de vazamento de gás, os pesos 2, 5 e 10 para áreas com média probabilidade de vazamento de gás e os pesos 3, 4, 25 e 100 para áreas com alta probabilidade de vazamento de gás. Para este estágio de testes, os pesos do nós foram aleatoriamente escolhidos. Esta etapa de escolha do conjunto de pesos mais apropriado foi crucial pois era necessário que as restrições do problema de cobertura de área continuassem sendo cumpridas.

No que diz respeito à modelagem matemática, o problema de cobertura é definido pelo conjunto de Equações: Equação (1) que está sujeita às Equações (2) e (3). A modelagem compreende a função objetivo (*Z*) que deve ser minimizada por um conjunto de restrições que garantam a cobertura total da área de processo.

$$\text{Min } Z = \sum_{j=1}^n c_j x_j \quad (1)$$

$$\sum_{j=1}^n a_{i,j} x_j \leq b_i \quad j = 1, \dots, m \quad (2)$$

$$x_j = 0, 1 \quad j = 1, \dots, n \quad (3)$$

Na Equação 1, c_j é o vetor custo, que representa os valores dos nós do grafo, e x_j é a variável de decisão. Na Equação 2, $a_{i,j}$ são os coeficientes da matriz adjacente do grafo $G = (X, V)$, b_i é o vetor do lado direito e m é o número de restrições. Na Equação 3, n é o número de variáveis. A variável de decisão x recebe o valor de 0 ou 1. Se a célula possui um detector de gás, $x = 1$, se não, $x = 0$. Nas Equações 1 e 2, i é o número de nós, e em todas as Equações acima, j é o número de células ou sítios.

O vetor custo c_j , por sua vez, é diretamente proporcional com a frequência de vazamentos dos segmentos da planta química. Sendo F_k o número de vazamentos de gás ocorrido no segmento j da planta, e q o número de segmentos, tem-se que o vetor custo de relaciona com a frequência de vazamentos através da Equação 4.

$$c_j \propto \frac{F_k}{\sum_{k=1}^q F_k} \quad (4)$$

3.2 Fluidodinâmica computacional

Depois de decisão do melhor conjunto de pesos e da análise de como tais pesos afetam a alocação dos detectores, uma área de processo 3D foi escolhida para ser usada tanto nas simulações CFD (vazamento de amônia) quanto no software Optimi (otimização de detectores). A modelagem numérica foi realizada no Ansys 19.2 CFX. A malha computacional foi construída seguindo a modelagem de vazamento de gás para pequenas taxas de acordo com a orientação do material da CETESB.

Então, 40 simulações de vazamento de amônia em regime permanente em 5 direções diferentes para 8 direções de vento com uma taxa de descarga de 0,25 kg/s foram realizadas. O tamanho do espaçamento usado no Optimi foi escolhido com base no volume da menor nuvem, porque se um detector de gás consegue detectar a menor nuvem ele também conseguirá detectar as maiores. Portanto, o espaçamento (L) foi calculado pela Equação 5, na qual V é o volume das nuvens obtidas pelas simulações CFD. Para o cálculo dos volumes das nuvens foi considerada uma concentração de amônia de 20 ppm.

$$L = \sqrt[3]{\text{Min } V} \quad (5)$$

Então, depois de realizada a simulação no Optimi com o espaçamento da malha definido, foram usadas as coordenadas da solução da otimização como pontos de monitoramento no Ansys. Feito isso, uma nova simulação de CFD em regime transiente foi realizada para o caso de menor nuvem de amônia encontrada previamente, porém agora com os pontos de detecção. O vazamento foi iniciado no tempo de 20 s. Por fim, foram analisadas as concentrações de amônia em cada um dos detectores a fim de se determinar quais deles conseguiram detectar concentrações de amônia de 20 ppm.

4 Resultados

Os resultados também foram divididos em duas partes: Optimi e modelagem numérica de escoamento de fluidos para otimização e cobertura.



4.1 Optimi - Uma ferramenta computacional

Na realização de testes preliminares com os pesos 1, 2 e 3 observou-se que o programa cobria toda a área de processo. Entretanto, para pesos 1, 10 e 100 o programa não funcionava. Foram também testados os pesos 1, 2 e 4 e 1, 5 e 25. A ideia era de avaliar como o valor da função objetivo influenciaria na execução do Optimi. Os pesos foram atribuídos aleatoriamente na malha. A Tabela 1 mostra para todos os casos testados quais o programa encontrou uma solução ('Ok') e para quais casos ele não encontrou solução dentro do limite de tempo máximo estipulado de 3 dias para que o programa encontrasse uma solução ótima ('Não'). 'Error' significa que o programa não foi executado. Uma vez que para todos os casos testados com pesos 1, 2 e 3 o programa encontrou uma solução, esses pesos foram atribuídos na função objetivo do programa de otimização.

Tabela 1: Testes dos nós valorados.

Pesos	3x3	4x4	5x5	6x6	7x7	8x8	9x9
1, 2 e 3	Ok	Ok	Ok	Ok	Ok	Ok	Ok
1, 2 e 4	No	No	No	No	Ok	Ok	No
1, 5 e 25	No	No	No	No	No	No	No
1, 10 and 100	No	No	No	No	No	Error	Error

A Figura 1 mostra várias soluções ótimas para áreas com diferentes números de sub-áreas em que os pesos 3 (maior probabilidade de se ocorrer vazamento acidental de gás) foram concentrados no canto inferior esquerdo delas. Através dessa figura é possível observar que toda área de processo foi coberta pelos dispositivos (as setas simbolizam o poder de cobertura de cada dispositivo).

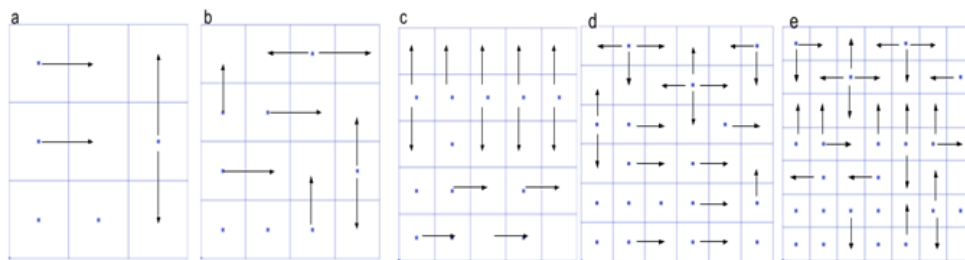


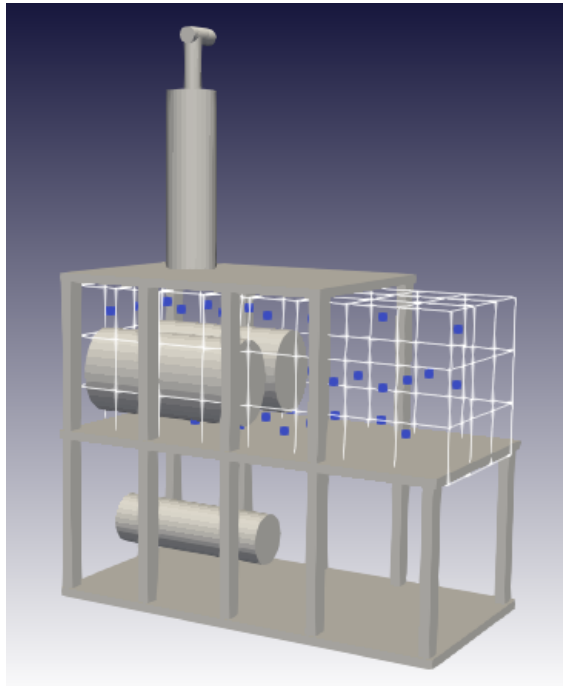
Figura 1: Soluções ótimas para uma área de processo dividida em (a) 9 sub-áreas, (b) 16 sub-áreas, (c) 25 sub-áreas, (d) 36 sub-áreas e (e) 49 sub-áreas.

Pelos testes efetuados observou-se que os pesos 1, 2 e 3 satisfazem o problema de cobertura, pois em todos os casos estudados toda a área de processo foi coberta pelos dispositivos de detecção de gás. Ainda, esses pesos satisfazem o problema dos nós valorados, pois o programa Optimi mostrou que as áreas com menor probabilidade de se ocorrer vazamentos de gás acidental ficam mais protegidas, uma vez que seguindo o problema de otimização da Equação 1 a função Z deve ser minimizada, então vetores custo c_j serão mais recorrentes para valores mais baixos. Dessa forma, é seguro estabelecer esses pesos para análises futuras.

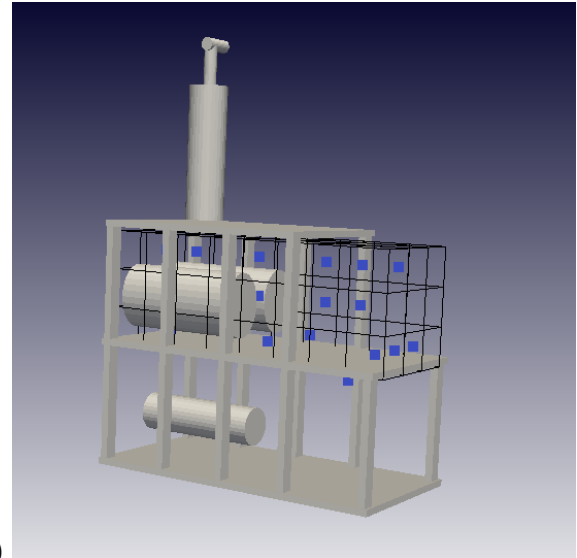
Com o conjunto de pesos escolhido e com a geometria da Figura 2.a, foi realizada uma simulação com nós valorados para a parte do meio da geometria. O espaçamento utilizado foi de 6 m e o cálculo desse espaçamento é descrito na próxima subseção. A resposta do Optimi para esse caso foi a alocação de 34 detectores de gás. A mesma geometria foi utilizada para o caso sem pesos para os nós, e o resultado para este caso está na Figura 2.b. Já esse caso contou com 21 detectores. Tal diferença segue a tendência esperada.

4.2 Fluidodinâmica computacional

Através das 40 simulações de vazamento de amônia realizadas no CFX Ansys 19.2, foi observado que o volume da menor nuvem foi de $225,8 m^3$. Portanto, usando a Equação 5, o valor do espaçamento é de 6 m. A Figura 3.a mostra a menor nuvem de amônia formada pelo vazamento e a Figura 3.b, a maior.

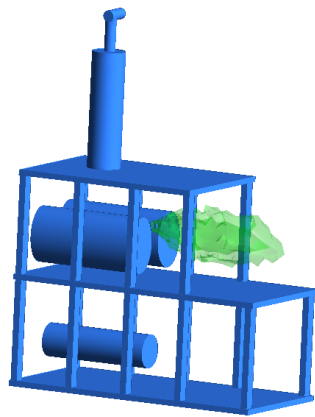


(a)

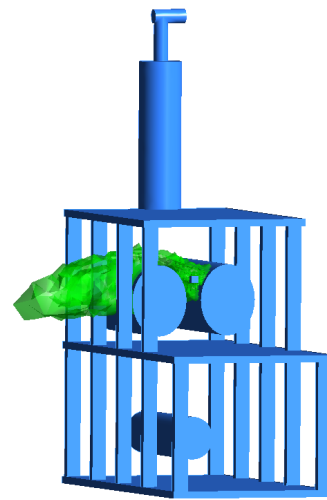


(b)

Figura 2: Solução ótima para a área de processo estudada com 72 subdivisões em que os pontos representam detectores de gás (a) com a utilização de nós valorados e (b) sem a utilização de nós valorados.



(a)



(b)

Figura 3: (a) Menor nuvem de amônia formada e (b) Maior nuvem de amônia formada.

Dos 34 detectores propostos pela solução ótima do problema de cobertura de área com pesos, 3 deles foram capazes de detectar o vazamento de amônia à 20 ppm. A Figura 4.a mostra a concentração de NH_3 nesses três detectores. Pela análise dela, percebe-se que o Monitor 11 detectou o vazamento em 5 s após o início dele, já o Monitor 12, em 17 s e o Monitor 27, em 34 s. Dos 21 detectores propostos pela solução ótima do problema de cobertura de área sem pesos, 3 deles foram capazes de detectar o vazamento de amônia à 20 ppm. A Figura 4.b mostra a concentração de NH_3 nesses três detectores. Pela análise dela, percebe-se que o Monitor 12 detectou o vazamento em 17 s após o início dele, já o Monitor 18, em 35 s e o Monitor 19, em 28 s.

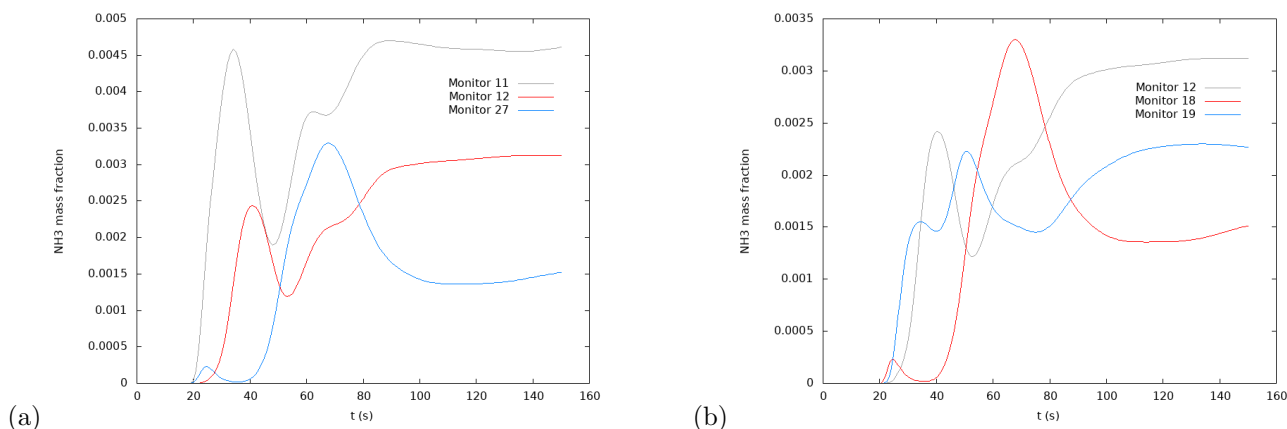


Figura 4: Concentração de NH_3 ao longo do tempo nos detectores de gás para o caso (a) com nós valorados e (b) sem nós valorados.

Comparando-se os resultados acima, percebe-se que o tempo de detecção de vazamento para o caso com pesos nos nós é bem menor do que para o caso sem pesos. Isso comprova a vantagem de se utilizar mais detectores para proteger uma área de processos levando em conta suas frequências de vazamento, visto que, para o caso estudado, com os pesos, a detecção do vazamento de amônia ocorre 12 s mais rápido quando se comparado a caso sem pesos.

5 Conclusões

No que diz respeito à aplicação de subconjunto externamente estável de Grafo com nós valorados, de todas as simulações realizadas, foi observado que os pesos 1, 2 e 3 satisfazem o problema de cobertura, porque para todos os cenários estudados se foi obtido 100% de cobertura. Além disso, esse conjunto de pesos também respeita o conjunto de restrições do Grafo com nós valorados. Nesse mesmo sentido, a modificação realizada no software Optimi mostrou que áreas com maiores chances de se ocorrer vazamento de gás são mais protegidas pelos detectores quando se comparado com as áreas de menores chances. Ademais, através das simulações de CFD foi possível determinar o volume da menor nuvem de amônia formada pelo vazamento e, dessa forma, o tamanho do espaçamento usado na malha de otimização, que foi de $6m$.

Além disso, com a utilização de pesos no problema de otimização para a detecção de vazamento de gás, através das simulações de CFD, foi possível detectar o vazamento em 5 s. Já para o caso sem pesos, a detecção mais rápida ocorreu em 17 s. A diferença de 12 s na detecção do vazamento de amônia entre os casos com e sem peso, mostra que os pesos protegem mais a área e que justifica a utilização de mais detectores. Portanto, essa pesquisa mostrou o bom funcionamento de nós valorados para o problema de cobertura em caso de vazamento acidental de gás em uma planta química. Ainda, desenvolveu-se um procedimento para o estudo de alocação de detectores de gás levando em conta a frequência de vazamento dos segmentos de uma área de processos.

6 Referências

1. Vianna S.S.V. Optimisation of gas detectors using mathematical programming and computational fluid dynamics. Master thesis. COPPE-UFRJ. Federal University of Rio de Janeiro. 2004.
2. Vianna S.S.V. The set covering problem applied to optimisation of gas detectors in chemical process plants. *Comp. Chem. Eng.* 121, 388-395. 2019.
3. Vianna S.S.V., Ferreira Filho V.J. A proposal for optimisation and location of gas detectors using mathematics programming and computational fluid dynamics. *Cong. Lat. Iberoamericano de Invest. de Oper. y Sist.* 4-8 October. La Habana, Cuba, 200