

República Federativa do Brasil
Ministério do Desenvolvimento, Indústria
e do Comércio Exterior
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(21) **PI0900957-4 A2**

(22) Data de Depósito: 27/03/2009
(43) Data da Publicação: 20/07/2010
(RPI 2063)



(51) *Int.Cl.:*
F23N 5/00

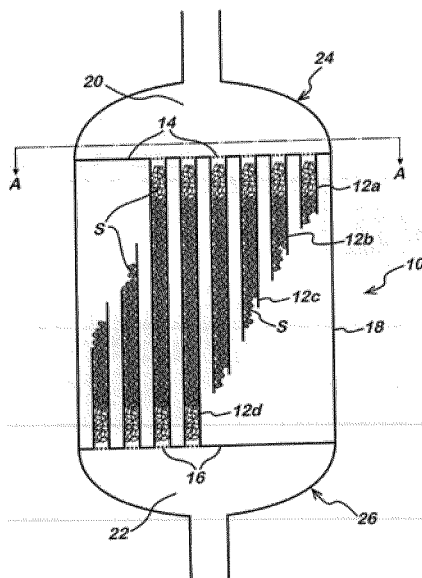
(54) Título: **MÉTODO PARA ATENUAR PRESSÃO DE DEFLAGRAÇÃO PRODUZIDA POR COMBUSTÃO DE GÁS COMBUSTÍVEL EM UMA REGIÃO DEFINIDA DE UM VASO DE PROCESSO, REATOR TUBULAR ADAPTADO PARA ATENUAÇÃO DA PRESSÃO DE DEFLAGRAÇÃO RESULTANTE DA COMBUSTÃO DE GÁS COMBUSTÍVEL NO MESMO, E, MÉTODO PARA REALIZAR REAÇÕES EM FASE GASOSA SEGURAMENTE EM CONDIÇÕES OPERACIONAIS INFLAMÁVEIS**

(30) Prioridade Unionista: 31/03/2008 US 61/072502

(73) Titular(es): Rohm And Haas Company

(72) Inventor(es): James Elder, John Sornson, Michael de Courcy, Nam Quoc Le, Patrick Pugh, Timothy Hale

(57) Resumo: É descrito um método para atenuar pressão de deflagração produzida por combustão do gás combustível em uma região definida de um vaso de processo. O método, no geral, compreende selecionar e colocar material de atenuação na região definida do vaso de processo, em que o material de atenuação selecionado mantém sua forma física nas condições operacionais. O material de atenuação deve ocupar pelo menos 20% do volume da região definida do vaso de processo. O uso do método inventivo pode ser benéficamente aplicado para a operação segura de reatores de oxidação com alimentações de alta concentração de hidrocarbonetos inflamáveis, de maneira a atingir maior produtividade. A invenção também fornece um reator tubular adaptado para atenuar a pressão de deflagração resultante da combustão de gás combustível na região definida nele, em que a região definida do reator tubular compreende material de atenuação selecionado de acordo com o método anterior para atenuar pressão de deflagração e que tem uma pluralidade de componentes que é colocada de maneira tal que espaços vazios e caminhos abertos entre os componentes sejam minimizados. Um método para realizar reações em fase gasosa seguramente em condições operacionais inflamáveis é fornecido, em que uma composição de alimentação de gás compreendendo um hidrocarboneto e oxigênio é submetida a reação em um vaso de reação com materiais de atenuação nele e a reação é conduzida a uma temperatura e uma pressão que tomam o sistema de reação inflamável. Usando o aparelho inventivo, pode-se alcançar contenção total de pressão, eliminando assim a necessidade de dispositivos de alívio de pressão de emergência.



“MÉTODO PARA ATENUAR PRESSÃO DE DEFLAGRAÇÃO
PRODUZIDA POR COMBUSTÃO DE GÁS COMBUSTÍVEL EM UMA
REGIÃO DEFINIDA DE UM VASO DE PROCESSO, REATOR
TUBULAR ADAPTADO PARA ATENUAÇÃO DA PRESSÃO DE
5 DEFLAGRAÇÃO RESULTANTE DA COMBUSTÃO DE GÁS
COMBUSTÍVEL NO MESMO, E, MÉTODO PARA REALIZAR
REAÇÕES EM FASE GASOSA SEGURAMENTE EM CONDIÇÕES
OPERACIONAIS INFLAMÁVEIS”

CAMPO DA INVENÇÃO

10 A presente invenção diz respeito a um método e aparelho para
controlar, conter e suprimir explosão de gás combustível em um vaso de
processo.

FUNDAMENTOS DA INVENÇÃO

O manuseio de materiais combustíveis, embora necessário em
15 muitos processos e usinas industriais, freqüentemente apresenta um perigo em
virtude do potencial de inflamação, detonação ou explosão dos materiais
combustíveis em equipamento de processo, danificando assim o equipamento
e ferindo o corpo de funcionários. Materiais combustíveis estão
freqüentemente presentes na forma de líquidos, gases, ou ambos nos reatores,
20 condutos, vasos de armazenamento, aparelho de separações, etc. de vários
processos de fabricação, tais como os que produzem (met)acrilatos, ésteres de
(met)acrilato, nitrilas e vários outros materiais.

Quando gás combustível está presente em concentrações
suficientes, em volume, com oxigênio, a exposição a uma fonte de ignição,
25 tais como uma centelha, uma reação química, um fio quente ou outras
superfícies quentes ou mesmo um ponto quente (isto é, uma região localizada
de maior temperatura no corpo do fluido), pode iniciar a deflagração
localizada no gás combustível. Gases combustíveis, no geral, deflagram em
concentrações acima do limite explosivo inferior e abaixo do limite explosivo

superior do gás combustível. Gás combustível pode, certamente, ser composto de um único tipo de gás, mas é frequentemente uma mistura de um ou mais gases diferentes, cuja composição particular torna a mistura combustível. Onde um gás combustível está presente, sempre há algum risco de deflagração em virtude de ignições negligentes não poderem ser 100 % prevenidas.

A deflagração pode ou não progredir, finalmente, a um ou mais eventos danosos adicionais, tal como detonação ou explosão. Certamente, tais eventos têm o potencial de causar dano severo ao equipamento, bem como sérios ferimentos, ou mesmo morte, ao corpo de funcionários que opera e monitora o equipamento. Assim, o controle, contenção e supressão da ignição, combustão, deflagração e detonação ou explosão de materiais combustíveis são de importância crítica à segurança da operação e andamento de muitas operações de fabricação e processamento industrial. Embora alguns aparelhos e técnicas sejam voltados à evitação da ignição, outras tentativas de conter, suprimir e extinguir um evento de combustão que seria de outra forma desenvolvido seguindo ignição negligente. Ver, por exemplo, Gressel, Stanley S., Ed., *Deflagration and Detonation Flame Arresters*, AIChE (Center for Chemical Process Safety), New York, New York (2002), Capítulo 5, pp.77-138.

Por exemplo, patente U.S. No. 3.356.256 descreve o uso de rede de metal que dissipa o calor em recipientes de armazenamento de combustível como um meio de absorver calor no recipiente que pode, de outra forma, levar à ignição. A patente U.S. No. 4.613.054 descreve o uso de bolas de película de alumínio com alta condutividade térmica para obter o mesmo resultado. Ambas as abordagens procuram empregar um dissipador de calor para impedir que se chegue a uma combustão prolongada.

Similarmente, Fauske (ver, Fauske, Hans K., *Expanded-Metal Networks: A Safety Net to Thwart Gas Explosions*, Chemical Engineering

Progress, Dec 2001, pp.66-71) propõe o uso de películas de metal expandidas, como dissipadores de calor nos tanques de armazenamento para prevenir propagação frontal da chama, removendo a energia térmica da zona de combustão. Fauske imita o projeto de controladores de deflagração empregando lâminas de metal de alta área superficial ($400 \text{ m}^2/\text{m}^3$ e maior) com passagens estreitas para apagar a chama. Em tanques de armazenamento relativamente estáticos, tais passagens estreitas são de pequena consequência. Entretanto, em vasos de processo, tais como reatores, o fluxo de fluidos de processo através das passagens estreitas aumenta a queda de pressão através do vaso e, conseqüentemente, aumenta o consumo de energia de força motriz. Adicionalmente, de maneira que as redes de película metálica efetivamente finalizem a combustão (e, desta forma, evitem subsequente progressão para detonação ou explosão), um diferencial de temperatura suficientemente grande (ΔT) deve ser mantido de maneira que a energia térmica da zona de combustão possa ser rapidamente transferida para a película metálica. Infelizmente, muitos vasos de processo usados para manusear, reagir ou armazenar gases combustíveis são operados em condições de temperaturas e/ou pressões elevadas. Conforme se sabe na técnica de processamento de hidrocarbonetos, o aumento do calor e pressão ambos amplia os limites de inflamabilidade (maior faixa de composição que suporta combustão) e reduz o incremento energético necessário para manter combustão auto-sustentável. Assim, em muitos vasos de processo de gás combustível, tais como reatores de oxidação, o uso de componentes que dissipam o calor, tais como películas de metal expandidas, é bastante inefetivo para finalizar a combustão. A propagação da onda de pressão de deflagração e frente da chama em vasos de processo de temperatura e pressão como estas é simplesmente tão rápida para que a absorção de calor ocorra em uma taxa que é suficiente para finalizar a combustão.

A patente U.S. No. 5.495.893 descreve um aparelho e método

para controlar deflagração de gases, em que o aparelho inclui um detector de substância combustível que dispara a distribuição de um supressor de deflagração na substância combustível, por um dispositivo que atomiza líquido para controlar o tamanho das gotículas supressoras de líquido. A

5 descrição desta patente estabelece que a deflagração pode ser efetivamente suprimida por absorção de calor, tal como utilizando uma corrente líquida de névoa fina (isto é, o supressor de deflagração) que pode ser rapidamente vaporizado para rapidamente remover o calor pelo qual uma deflagração se propaga. Esta solução se baseia no entendimento que, em uma deflagração, a

10 combustão de um gás combustível inicia uma reação química que propaga para fora transferindo calor e/ou radicais livres a moléculas adjacentes do gás combustível. A transferência de calor e/ou radicais livres inflama as moléculas adjacentes e, desta maneira, a deflagração se propaga ou expande para fora através do gás combustível.

15 A patente U.S. No. 6.540.029 descreve um sistema de supressão da deflagração e isolamento da explosão que tem o objetivo de suprimir o estágio de deflagração de um fenômeno de explosão e prevenção da deflagração que origina em uma estrutura de contenção da propagação em um conduto associado e então mudança no fenômeno de detonação no

20 conduto. O sistema descrito nesta patente inclui um detector de pressão para detectar um rápido aumento de pressão, que é indicativo de uma explosão incipiente e um dispositivo de supressão que direciona um agente de supressão de fogo nos gases combustíveis, bem como um conjunto de válvula gaveta que fecha em tandem com liberação do agente de supressão para

25 redirecionar a chama e pressões geradas pela combustão. Novamente, o dispositivo na patente U.S. No. 6.540.029 opera para introduzir um material adicional, um agente supressor, no gás combustível para absorção de calor que, de outra maneira, facilita a propagação da deflagração e sua transição para detonação. Esta patente reconhece que, durante um evento de

deflagração, uma onda de pressão e uma frente da chama são gerados no ponto de ignição e propagam para fora em todas as direções, com a onda de pressão viajando mais rápido que a frente da chama. Além disso, obstáculos e curvas em uma tubulação ou conduto contendo o gás combustível aumentarão a turbulência (isto é, mistura) que, por sua vez, acelera a transição da deflagração para detonação. Conforme bem conhecido na técnica, aumentos na turbulência e mistura de gás combustível devem ser evitadas na implementação de medições de controle de deflagração.

Em Razus D., et al., *Closed vessel combustion of propileno-air mixtures in the presence of exhaust gas*, Fuel (2007), doi:10.1016/j.fuel.2006.12.009, reconhece-se que parâmetros característicos da propagação da explosão em vasos fechados incluem a pressão de pico alcançada depois da deflagração, o tempo necessário para alcançar a pressão de pico e a diminuição da pressão de pico alcançada pela introdução de material diluente em um gás combustível depois da ignição. Este artigo de pesquisa conclui que o gás de exaustão, que tipicamente contém dióxido de carbono e vapor de água, tem um importante efeito inerte nas misturas combustível-ar inflamáveis e pode ser considerado um diluente barato para mitigação de explosões combustível-ar. Embora esta técnica seja direcionada ao controle ou minimização de uma explosão depois da ignição de gás combustível, ela se dá adicionando um material inerte, que é similar ao método de introduzir supressores de chama a um gás combustível depois da ignição para absorver calor e lenta propagação da frente da chama durante a deflagração.

A técnica descrita na patente U.S. No. 6.932.950 é uma tentativa de minimizar ou eliminar reações secundárias incluindo, mas sem limitações, a ignição e deflagração,, que têm maior risco de ocorrer no lado da entrada de um reator tubular onde a mistura gasosa de alimentação é um gás combustível que entra em contato com os pontos quentes próximos à película

do tubo da entrada do reator. Esta patente discute as práticas previamente conhecidas de colocar uma camada de materiais cerâmicos, ou malha de arame, na câmara de entrada, adjacente à chapa do tubo de entrada no lado do gás de entrada, mas não preenchendo mais que cerca de 20 % do volume da câmara, para criar uma barreira entre o gás de alimentação de entrada e a película do tubo quente. Outros métodos descritos incluem criar uma câmara de resfriamento próxima à película do tubo quente (câmara é preenchida com ar circulante), bem como formar uma barreira sólida (por exemplo, usando material de resina vertida para formar uma camada adjacente à película do tubo, no lado carreador de calor para isolar a película do tubo do carreador de calor). A solução descrita na patente U.S. 6.932.950 é o fornecimento de uma câmara de isolamento separada na câmara de entrada do reator que é próxima e no lado de entrada da película do tubo. A câmara de isolamento é classificada e modelada para ser comensurável com a seção transversal da película do tubo e é tanto evacuada quanto preenchida com ar, areia, óleo ou qualquer outro material sólido, líquido ou gasoso adequado incapaz de reagir com o carreador de calor. Todas estas técnicas são dirigidas à prevenção da ignição e outras reações laterais indesejáveis colocando uma barreira de material entre a película do tubo quente e correntes de alimentação gasosa de entrada. Nenhuma destas técnicas envolve o preenchimento das regiões de entrada ou saída de gás do reator com material de atenuação adequadamente modelado e classificado que desvia a onda de pressão de uma deflagração, depois da ignição negligente para finalizar e conter a deflagração e prevenir a progressão para detonação.

Um dispositivo para desviar fisicamente a frente da chama de um evento de deflagração é descrito na patente U.S. No. 7.000.630, em que um dispersor de frente da chama direciona a onda de pressão de alta velocidade em direção a um disco de ruptura bidirecional que faz com que o disco de ruptura abra, criando assim um efeito de aspiração do disco de

ruptura bidirecional oposto, que cria um caminho de escape para a onda de pressão e frente da chama, bem como extraindo ar fresco como um diluente. O dispositivo que desvia a frente da chama descrito nesta é projetado para prevenir uma deflagração da propagação de um vaso para o outro.

5 Ainda existe uma necessidade de um método efetivo, simples e econômico para controlar, conter e suprimir explosão de gás combustível em um vaso de processo. Requerentes desenvolveram um método e aparelho que se direcionam a esta necessidade atenuando e, desta forma, diminuindo a onda de pressão criada durante uma deflagração para prevenir a deflagração da
10 mudança para detonação, em vez de tentar suprimir e finalizar a frente da chama removendo calor de um gás combustível que foi inflamado fornecendo materiais sólidos conhecidos por absorver calor no vaso de processo, ou introduzindo materiais retardantes ou supressores de chama depois que a ignição ocorreu.

15 SUMÁRIO DA INVENÇÃO

 A presente invenção fornece um método para atenuar pressão de deflagração produzida pela combustão de gás combustível em uma região definida de um vaso de processo em condições operacionais conhecidas compreendendo composição de gás de alimentação, temperatura e pressão
20 iniciais, em que uma pressão de pico é alcançada na região definida depois da ignição. O método, no geral, compreende selecionar e colocar material de atenuação na região definida do vaso de processo, em que o material de atenuação selecionado mantém sua forma física em condições operacionais e tem uma pluralidade de componentes, todos os quais têm uma geometria e um
25 diâmetro efetivo. O material de atenuação deve ocupar pelo menos 20 % da região definida do vaso de processo.

 A primeira etapa do método inventivo é determinar o diâmetro efetivo máximo dos componentes do material de atenuação que é adequado para uso na região definida do vaso de processo desenvolvendo dados

empíricos compreendendo pares associados de pressões de deflagração de pico e fatores de mistura de deflagração, que demonstram uma relação linear entre uma pluralidade de materiais de atenuação, pelo menos um dos quais tem componentes com um diâmetro efetivo que difere dos diâmetros efetivos dos componentes dos outros materiais de atenuação e as pressões de pico alcançadas depois da ignição de gás combustível tendo a mesma composição que a composição de gás de alimentação inicial. Isto é realizado: (1) determinando empiricamente a pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(0)$) resultante da ignição do gás combustível na ausência de qualquer material de atenuação, usando uma esfera de teste tendo um raio ($R(ts)$); (2) determinando empiricamente pelo menos uma primeira e uma segunda pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(1)$, $P_{\max}(2)$) resultante de ignição do gás combustível na presença de pelo menos um primeiro material de atenuação selecionado tendo um primeiro diâmetro efetivo ($Ds(1)$) e um segundo material de atenuação selecionado tendo um segundo diâmetro efetivo ($Ds(2)$) diferente do primeiro diâmetro efetivo, usando a mesma esfera de teste usada na etapa (1); (3) calculando os fatores de mistura de deflagração ($DMF(0)$, $DMF(1)$, $DMF(2)$, . . . $DMF(n)$) para cada pressão de deflagração de pico associada empiricamente determinada nas etapas (1) e (2), usando a seguinte relação matemática: $DMF(n) = (Ds(n)/Rts) \times 40$, em que $n = 0, 1, 2 \dots n$ e $Ds(n)$ e $R(ts)$ são cada um medidos em centímetros. Estas etapas são seguidas linearizando os dados empíricos compreendendo pares associados de pressões de deflagração de pico e fatores de mistura de deflagração ($[P_{\max}(0), DMF(0)]$; $[P_{\max}(1), DMF(1)]$, $[P_{\max}(2), DMF(2)]$, .. $[P_{\max}(n), DMF(n)]$) determinando o valor das variáveis M e B com base na seguinte relação matemática: $P_{\max}(n) = M \times DMF(n) + B$, em que $n = 0, 1, 2 \dots n$.

Depois que a linearização é realizada, o fator de mistura de deflagração máximo ($DMF(a)$) é calculado para o vaso de processo usando a máxima pressão de contenção permitida ($P(c)$) do vaso de processo e os

valores de M e B calculados na etapa (4), com base na seguinte relação matemática: $DMF(a) = [P(c) - B] / M$; e então o diâmetro efetivo máximo ($Ds(a)$) de material de atenuação adequado para uso com o vaso de processo tendo o raio transversal ($R(v)$), é calculado usando o seguinte relação matemática: $Ds(a) = [DMF(a) \times R(v)] / 40$.

Tendo calculado o diâmetro efetivo máximo ($Ds(a)$) para os componentes do material de atenuação, um material de atenuação adequado é selecionado. Um material de atenuação adequado terá um diâmetro efetivo Ds menor ou igual ao diâmetro efetivo máximo ($Ds(a)$) calculado para o vaso de processo particular e colocando o material de atenuação selecionado na região definida do vaso de processo. Os materiais de atenuação podem ser simplesmente vertidos ou manualmente dispostos na região definida do vaso de processo, dependendo se os componentes do material de atenuação são de auto-ordenação, de maneira que espaços vazios e abertura de caminhos entre os componentes sejam minimizados.

Em uma modalidade do método da presente invenção, a etapa de determinar empiricamente a pressão de deflagração de pico ($P_{max}(0)$) pode compreender: (a) inflamar o gás combustível na esfera de teste, que está de outra maneira vazio, na pressão e temperatura das condições operacionais pré-determinadas; e então (b) medir a maior pressão ($P_{max}(0)$) alcançada na esfera de teste, depois da ignição. Além disso, a etapa de determinar empiricamente pelo menos uma primeira e uma segunda pressão de deflagração de pico ($P_{max}(1)$, $P_{max}(2)$) compreende: (a) inflamar gás combustível na esfera de teste, depois de preenchê-la com o primeiro material de atenuação selecionado, na pressão e temperatura das condições operacionais pré-determinadas; (b) medir a maior pressão ($P_{max}(1)$) alcançada na esfera de teste preenchida com o primeiro material de atenuação selecionado, depois da ignição; (c) inflamar gás combustível na esfera de teste, depois de preenchê-la com o segundo material de atenuação selecionado, na pressão e temperatura das condições

operacionais pré-determinadas; e (d) medir a maior pressão ($P_{\max}(2)$) alcançada na esfera de teste preenchida com o segundo material de atenuação selecionado, depois da ignição. Também é possível determinar empiricamente uma pluralidade de pressões de deflagração de pico ($P_{\max}(1)$, $P_{\max}(2)$, $P_{\max}(3)$,
 5 . . . $P_{\max}(n)$) e então usar cada pressão de deflagração de pico nas etapas de cálculo e linearização subsequentes.

Em uma outra modalidade, o gás combustível compreende hidrocarbonetos e oxigênio e o vaso de processo pode ser um reator de casco e de tubo que opera nas condições de escoamento.

10 A presente invenção também fornece um reator tubular adaptado para atenuar a pressão de deflagração resultante da combustão de gás combustível nele. O reator tubular inventivo compreende material de atenuação tendo uma pluralidade de componentes, todos os quais têm uma geometria e que são colocados de maneira que espaços vazios e abertura de
 15 caminhos entre os componentes sejam minimizados, em que o material de atenuação ocupa pelo menos 20 % de pelo menos uma das regiões de entrada definida e o de saída definida do vaso de processo. Além do mais, os componentes do material de atenuação têm um diâmetro efetivo ($D_s(a)$) que satisfaz a seguinte relação matemática: $D_s(a) = [DMF(a) \times R(v)]/40$, em que
 20 $D_s(a)$ é em centímetros. Adicionalmente, ($DMF(a)$) é o fator de mistura de deflagração associado ao material de atenuação e que é determinado empiricamente pelo método da presente invenção descrito anteriormente. Finalmente, $R(v)$ é o raio de qualquer que seja a região de entrada definida ou de saída definida ocupada pelo material de atenuação.

25 A presente invenção adicionalmente fornece um método para realizar reações em fase gasosa seguramente em condições operacionais inflamáveis, que compreende uma composição de alimentação de gás, temperatura e pressão. Este método envolve: (A) fornecer um vaso de reação tendo uma região definida por meio da qual a dita composição de alimentação

de gás passa, a dita região definida sendo pelo menos 20 % em volume ocupada por pelo menos um material de atenuação que mantém sua forma física nas condições operacionais inflamáveis; (B) fornecer um ou mais materiais gasosos compreendendo um hidrocarboneto, um gás contendo oxigênio e, opcionalmente, um material inerte, ao dito vaso de reação para formar a dita composição de alimentação gasosa que passa através da dita região definida; e (C) submeter a dita composição de alimentação gasosa a uma ou mais reações no vaso de reação, a uma temperatura e pressão em que a dita composição de alimentação gasosa é inflamável.

O material de atenuação pode ser selecionado de acordo com o método para atenuar a pressão de deflagração produzida pela combustão de gás combustível descrita anteriormente. Em uma modalidade do método para realizar reações em fase gasosa seguramente em condições operacionais inflamáveis, o hidrocarboneto compreende propileno que é submetido a oxidação em um vaso de reação tendo materiais de atenuação compreendendo cilindros de malha de arame ondulado e poliedros de malha de arame ondulado. Em uma outra modalidade do método para realizar reações em fase gasosa seguramente em condições operacionais inflamáveis, os materiais gasosos adicionalmente compreendem amônia, o hidrocarboneto compreende metano e as reações em fase gasosa compreendem amoxidação do metano, em que os materiais de atenuação compreendem poliedros de espuma cerâmica.

DESCRIÇÃO RESUMIDA DOS DESENHOS

Um entendimento mais completo da presente invenção será obtido das modalidades discutidas daqui em diante e com referência aos desenhos em anexo, em que números de referência indicam características e em que:

Figura 1 é uma vista lateral em elevação parcialmente transversal esquemática de um vaso de processo, isto é, um reator tubular para reações em fase gasosa catalíticas;

Figura 2 é uma vista planar superior esquemática transversal da região de entrada definida do reator tubular da figura 1, tomada ao longo da linha A-A e olhando na direção das setas;

Figura 3A é uma vista lateral em elevação transversal esquemática somente da região de entrada definida do reator tubular da figura 1, mostrando a chapa do tubo de entrada e a cabeça do reator;

Figura 3B é uma vista lateral em elevação transversal esquemática da região de entrada definida da figura 3A, mostrando a chapa do tubo de entrada e a cabeça do reator e contendo material de atenuação que compreende componentes de esfera cerâmica;

Figuras 4A-4C são uma série de imagens gráficas geradas por modelo de computador mostrando a progressão de uma frente da onda de pressão de deflagração do ponto de ignição em uma região definida que não contém nenhum material de atenuação;

Figuras 5A-5J são uma série de imagens gráficas geradas por modelo de computador mostrando a progressão de uma frente da onda de pressão de deflagração do ponto de ignição em uma região definida que contém material de atenuação compreendendo esferas cerâmicas;

Figura 6 é uma vista lateral em elevação de um conjunto da cabeça da entrada do reator conectada a um reator tubular, formando um volume de topo livre fechado (região de entrada definida) com a chapa do tubo de entrada, mostrando a disposição e posição dos componentes da malha usados para material de atenuação nele;

Figura 7A é uma vista superior transversal do conjunto de entrada do reator da figura 6, tomada ao longo das linhas R-R e olhando na direção das setas, mostrando a disposição e posição dos componentes da malha usados para material de atenuação nele, a vista superior transversal tomada ao longo das linhas S-S, T-T, U-U e V-V são as mesmas que as apresentadas na figura 7A;

Figura 7B é uma vista superior transversal do conjunto de entrada do reator da figura 6, tomada ao longo das linhas X-X e olhando na direção das setas, mostrando a disposição e posição dos componentes da malha usados para material de atenuação nele;

5 Figura 7C é uma vista superior transversal do conjunto de entrada do reator da figura 6, tomada ao longo das linhas Y-Y e olhando na direção das setas, mostrando a disposição e posição dos componentes da malha usados para material de atenuação nele;

10 Figura 7D é uma vista superior transversal do conjunto de entrada do reator da figura 6, tomada ao longo das linhas Z-Z e olhando na direção das setas, mostrando a disposição e posição dos componentes da malha usados para material de atenuação nele;

15 Figura 8 é uma representação generalizada das mudanças na pressão de deflagração com o tempo, começando no tempo de ignição e terminando com a pressão homogeneizada que segue;

Figura 9 é um diagrama que mostra como o diâmetro efetivo dos componentes do material de atenuação cilíndrico é aproximado com base no diâmetro de um círculo circunscrito;

20 Figura 10 é um gráfico que demonstra a linearização dos dados empíricos, isto é, fator de mistura de deflagração (DMF) em função da pressão de deflagração máxima ($P_{\max}$), derivada de experimentos conduzidos com material de atenuação compreendendo esferas de alumina ocas e cálculos de acordo com a presente invenção; e

25 Figura 11 é um gráfico de dados empíricos, isto é, fator de mistura de deflagração (DMF) em função da pressão de deflagração máxima ($P_{\max}$), derivada de experimentos conduzidos com material de atenuação compreendendo anéis Pall e cálculos de acordo com a presente invenção.

DESCRIÇÃO DETALHADA DA INVENÇÃO

O método da presente invenção é adequado para atenuar a

pressão de deflagração produzida pela combustão de gás combustível em uma região definida de um vaso de processo. O método envolve selecionar e colocar material de atenuação na região definida para desviar e fragmentar a onda de pressão associada com a deflagração.

5 Um “vaso de processo” significa qualquer aparelho que é usado em conexão com o armazenamento, transporte, reação, fabricação, manuseio ou outra manipulação das substâncias combustíveis.

10 Uma “região definida,” da forma que este termo é aqui usado, é a área designada em um vaso de processo para ser protegida dos efeitos de uma deflagração. A região definida é tipicamente uma área fechada contendo um gás combustível ou uma área no vaso de processo em que o risco de uma deflagração é maior. A localização, geometria e volume da região definida variarão dependendo da aplicação e do vaso de processo.

15 Da forma aqui usada, o termo “volume de preenchimento” refere-se ao volume aparente ocupado pelo material de atenuação em uma região definida e é igual ao volume combinado realmente ocupado pelos componentes do material de atenuação e os espaços vazios intersticiais entre os componentes.

20 “Gases combustíveis” são gases que estão presentes em composições e concentrações suficientes, em volume, com oxigênio e cuja exposição a uma fonte de ignição, tais como uma centelha, uma reação química, um fio quente ou outra superfície quente, ou mesmo um ponto quente (isto é, uma região localizada de maior temperatura no corpo do fluido) pode iniciar a deflagração localizada no gás combustível. Gás
25 combustível pode, certamente, ser composto de uma única espécie de gás, tais como hidrogênio, butano, propileno, etc., mas é frequentemente uma mistura de um ou mais gases diferentes, cuja composição particular torna a mistura combustível.

Sem desejar ficar preso à teoria, acredita-se que a progressão

das condições em um gás combustível, da ignição à detonação e explosão é, no geral, entendida como se segue. Imediatamente na ignição, uma frente da chama esférica e uma onda de pressão esférica são formadas pela combustão local do gás combustível na fonte de ignição. Tanto a onda de pressão quanto a frente da chama tendem a propagar radialmente, em todas as direções, para fora e longe do ponto de ignição, nas porções não afetadas do gás combustível. Há tempos entende-se que a propagação da frente da chama envolve transferência de calor e que ela se dá muito mais lentamente que a propagação da onda de pressão, que viaja na velocidade do som. Este estágio de uma explosão incipiente é, no geral, referido como uma deflagração, isto é, quando a onda de pressão e a frente da chama viajam separadamente, com a onda de pressão na frente.

Durante uma deflagração, a frente da chama propaga para fora transferindo calor e/ou radicais livres às moléculas adjacentes do gás combustível, que inflama as moléculas adjacentes. Um radical livre é qualquer grupo reativo de átomos contendo elétrons não pareados, tais como OH, H e CH₃.

Também durante uma deflagração, a energia da onda de pressão pode comprimir porções não inflamáveis do gás combustível na frente da onda de pressão, reduzindo a necessidade de demanda de energia térmica para sustentar a combustão nestas porções de gás combustível, facilitando assim combustão adicional, acelerando a progressão da frente da chama e fortalecendo o avanço da onda de pressão. Este fortalecimento da onda de pressão continua até o ponto onde a onda de pressão sozinha é forte suficiente para iniciar a reação de combustão, iniciando assim o estágio de detonação. Inicialmente, a onda de detonação propagará no gás combustível comprimido e apanhará a onda de pressão dianteira, se tornando uma detonação estável com uma velocidade constante. Uma onda de detonação estável consiste em uma onda de pressão intimamente acoplada a uma frente da chama, de

maneira tal que a energia liberada pela frente da chama suporte a onda de pressão.

Quando a deflagração ocorre em uma tubulação ou conduto, em que materiais tendem a viajar axialmente e a frente da chama atinge a
5 parede da tubulação ou conduto, ela muda de forma esférica para uma frente essencialmente plana. A medida em que a frente da chama plana continua a propagar para baixo na extensão da tubulação, ela começa a alongar e a superfície da chama aumenta. A medida em que a área superficial aumenta, a taxa de queima aumenta e, conseqüentemente, a velocidade de propagação da
10 chama aumenta. Em outras palavras, a frente da chama que propaga pode rapidamente transitar de um estágio de deflagração inicial para um estágio de detonação em um conduto.

O tamanho das moléculas do material combustível afeta o fenômeno de explosão geral, assim como o diâmetro do conduto ou vaso, por
15 meio do qual os produtos de combustão estão fluindo. Por exemplo, tubulações de diâmetro maior fornecem dissipadores de calor de menor calor que tubulações ou condutos de diâmetro menor. A configuração longitudinal da tubulação ou condutos também afeta a propagação da frente da chama e onda de pressão. Sabe-se na técnica que obstáculos e curvas na tubulação ou
20 conduto podem aumentar a turbulência que, por sua vez, tenderá a aumentar a área de superfície da chama, que leva ao aumento da frente da chama e causa transição para a detonação mais rápida.

Com referência resumida agora à figura 8, um diagrama de explosão simplificado que é típico para misturas de gás combustível é
25 apresentado. Certamente, na prática, cada um destes diagramas de explosão seria específico para uma composição particular de gás combustível. Tais diagramas são bem conhecidos na literatura técnica, tal como discutido, por exemplo, em “Explosions” W. Bartknecht, Springer-Verlag, New York, 1981 (em particular, ver capítulo 2, Explosions in Closed Vessels). Metodologias

de teste padronizadas foram desenvolvidas para coletar os dados necessários para produzir tais diagramas (ver, por exemplo, European Standards DIN EN 13673-1 e DIN EN 13673-2, Setembro 2003). Estas metodologias, no geral, requerem que a mistura de gás combustível sejam testadas e inicialmente mantidas em uma condição estática, em uma esfera de teste selada, adiabática e de outra forma vazia (por exemplo, sem material de carga).

O diagrama da figura 8 ilustra a progressão típica do evento de pressão de deflagração (ou “pressão de explosão”) em um volume de gás combustível como uma função do tempo transcorrido relativo ao momento quando o gás combustível é inflamado. O diagrama, no geral, compreende três estágios sequenciais.

No primeiro estágio, antes da ignição, a mistura gasosa existe em uma condição estática em uma pressão inicial (P_{inicial}) e temperatura inicial constante.

No segundo estágio, depois da ignição, a combustão da mistura gasosa é estabelecida e a frente da chama e onda de pressão associada formam e se expandem para fora do ponto de ignição. Isto resulta em uma pressão rapidamente crescente com o intervalo de tempo Δt até que a pressão de deflagração máxima, P_{max} , seja alcançada. Tipicamente, intervalo de tempo, Δt , deste estágio transicional tem na ordem de somente cerca de 100 a 300 microssegundos de duração. Notavelmente, transferência de calor suficiente para amortecer ou diminuir o evento de deflagração requereria significativamente mais tempo, tal como na ordem de cerca de 500 a 1.000 microssegundos (isto é, 0,5 a 1,0 segundos).

No terceiro estágio depois de atingir P_{max} , a pressão na esfera de teste cai com o intervalo de tempo Δt até que uma pressão inferior, de “estado estável”, P_{final} , seja alcançada. Tipicamente, durante um evento de deflagração, o intervalo de tempo, Δt , necessário para alcançar P_{final} tem na ordem de cerca de 1.000 microssegundos ou mais de duração.

Ao contrário dos preceitos da técnica anterior, requerentes verificaram que a promoção da mistura no volume de gás combustível tem o resultado surpreendente de diminuir a pressão de deflagração máxima, P_{max} .

Sem ficar preso à teoria, requerentes acreditam que a redução na magnitude de P_{max} é um resultado direto da mistura que ocorre durante o segundo estágio do evento de deflagração, em cujo tempo a onda de pressão se expande rapidamente para fora do ponto de ignição. Esta mistura é o resultado da onda de pressão sendo forçada a mudar a direção e subdivide a medida em que ela passa ao redor dos materiais de atenuação da pressão da presente invenção. Acredita-se que esta mistura “combine” o perfil de pressão no volume do gás, reduzindo a diferença entre a pressão de pico da frente da onda e a pressão do volume de gás inferior fora da frente de onda.

Requerentes adicionalmente supõem que o intervalo de tempo do aumento da pressão do segundo estágio é muito pequeno para tornar a transferência de calor um mecanismo inefetivo para remover energia da frente da chama que se estende. Consequentemente, as propriedades térmicas de quaisquer materiais de atenuação colocados no gás combustível volume são amplamente irrelevantes neste estágio inicial de deflagração e pode-se esperar que materiais de isolamento funcionem essencialmente da mesma maneira que materiais de alta condutividade térmica com relação à atenuação da P_{max} .

Finalmente, requerentes supõem que o declínio gradual na pressão do gás que ocorre no terceiro estágio do evento de deflagração é um resultado da entropia que rege a mistura gasosa a um perfil de pressão e temperatura relativamente uniformes. Dado um intervalo de tempo suficientemente longo, este efeito da entropia finalmente resulta no declínio do volume do gás para a pressão de estado estável final, P_{final} . Deve-se enfatizar, entretanto, que a utilidade do método da presente invenção é manifestar sua capacidade de P_{max} inferior, a pressão de deflagração máxima, em vez de P_{final} , a pressão de estado estável final.

Embora o método e aparelho da presente invenção sejam aplicáveis a vários tipos de vasos de processo em vários processos de produção, para facilitar a discussão e entendimento, eles serão daqui em diante descritos com relação a um reator tubular usado para reações em fase gasosa catalíticas que produzem produtos, tais como ácidos carboxílicos insaturados, nitritos insaturados, aldeídos, etc. de gases de hidrocarboneto, tais como propano, propileno, butano, butileno, etc.

Com referência agora à figura 1, é fornecida uma vista lateral em elevação esquemática, parcialmente cortada de um vaso de processo ao qual o método da presente invenção pode se adequadamente aplicado. Em particular, a figura 1 mostra uma vista lateral em elevação parcialmente cortada de um reator tubular 10 adequado para reações em fase gasosa catalíticas. O reator tubular 10 tem uma pluralidade de tubos 12a, 12b, 12c, 12d, cada um dos quais se estende entre uma primeira placa perfurada 14 e uma segunda placa perfurada 16 e contêm materiais sólidos S, tais como um ou mais tipos de catalisador e material inertes. A pluralidade de tubos 12a, 12b, 12c, 12d, bem como a primeira e segunda placas perfuradas 14, 16, são juntadas em um casco 18 que forma uma região para circulação de fluido de transferência de calor (não mostrada *per se*) em torno da pluralidade de tubos 12a, 12b, 12c, 12d para propósitos de controle de temperatura.

Ainda com referência à figura 1, uma tampa flangeada, ou “cabeça do reator” 24, é afixada por selagem ao perímetro do reator 10 próximo à primeira película do tubo 14, para formar uma região de entrada definida 20 em comunicação fluídica com os tubos do reator 12a, 12b, 12c, 12d, para permitir que os reagentes (não mostrado) e outros fluidos fluam através deles. Similarmente, uma outra tampa flangeada, ou “cabeça do reator” 26, é afixada de forma selada no perímetro do reator 10 próximo à segunda película do tubo 16, para formar uma região de saída definida 22, que também está em comunicação fluídica com os tubos do reator 12a, 12b, 12c,

12d permitindo que reagentes, produtos e outros fluidos (não mostrado) fluam através deles. Coletivamente, as regiões de entrada e saída definidas 20, 22 juntamente com a pluralidade de tubos 12a, 12b, 12c, 12d formam o lado de reação do reator tubular 10 em que uma ou mais reações químicas ocorrem, tal como, por exemplo, oxidação, durante a operação do reator tubular 10 nas condições de escoamento. O arranjo descrito anteriormente, em que a região de entrada definida 20 é posicionada no topo e a região de saída definida 22 é posicionada na base do reator tubular verticalmente orientado 10, claramente indica aos versados na técnica que o processo de reação está sendo operado em uma configuração "fluxo descendente". Entretanto, versados na técnica também perceberão facilmente que o método e aparelho da presente invenção são igualmente aplicáveis a outros vasos de processo, incluindo reatores tubulares operados em uma configuração "fluxo ascendente" (agora mostrado *per se*), em que a região de entrada definida seria posicionada na base do reator tubular.

Em algumas modalidades da presente invenção, instrumentação de monitoramento (não mostrada *per se*) pode ser posicionada na região definida do vaso de processo para detecção da combustão, aumento da temperatura local ou aumento da pressão local, de maneira tal que ajustes nas condições operacionais possam ser feitos incluindo, mas sem limitações, localização e reparo de falhas, redução nas taxas de operação ou parada de processo. Tal instrumentação de monitoramento pode incluir um ou mais de termopares, transdutores de pressão, sensores ultravioletas tipo "olho de chama" e analisadores de composição gasosa e pode opcionalmente ser conectada a sistemas de controle de processo distribuídos de maneira a iniciar uma resposta automática. Em algumas modalidades, a instrumentação de monitoramento (não mostrada) pode ser incorporada nos sistemas lógicos de travamento de segurança juntamente com outros cálculos e medidas do processo, tais como, por exemplo, cálculos de inflamabilidade ou taxas de

fluxo de corrente de alimentação do reator. Adicionalmente, em algumas modalidades, dispositivos de monitoramento redundantes podem ser usados para melhorar a segurança do sistema de monitoramento. Se dispositivos redundantes forem usados, eles podem opcionalmente ser configurados como parte de um sistema lógico de votação computadorizado, em que duas ou mais medições devem simultaneamente registrar uma condição anormal antes que a ação automática seja iniciada.

Em uma modalidade, por exemplo, uma região de entrada definida (cabeça de entrada) de um reator de oxidação tubular de fluxo descendente contém componentes de esfera cerâmica e pelo menos dez montagens de termopar de múltiplos pontos, cada um dos quais tem cerca de 10 pontos de medição por conjunto. Cada conjunto de termopar é inserido através de aberturas seláveis na porção superior da cabeça do reator (entrada), manualmente posicionada por dobramento para formar uma série predeterminada de círculos concêntricos igualmente espaçados e então presos nas braçadeiras de ancoragem pré-existentes na chapa do tubo de entrada. Em uma outra modalidade, uma região de entrada definida de um reator de oxidação tubular de fluxo ascendente contém componentes de cilindro de malha de arame e pelo menos seis montagens de termopar de múltiplos pontos tipo “K” com revestimentos de aço inoxidável 316 (comercialmente disponível da Gayesco of Pasadena, Texas, USA). As montagens de termopar de múltiplos pontos desta modalidade são inseridas por meio de gaxetas SWAGELOK (comercialmente disponíveis da Swagelok Company of Solon, Ohio, USA) que são montadas na parede lateral da cabeça do reator de entrada, manualmente posicionada por dobramento para ficarem próximas a uma distribuição predeterminada dos locais de medição e então afixadas em múltiplos locais ao longo de sua extensão nos cilindros de malha, usando pequenos comprimentos de fio.

Ainda em uma outra modalidade, amostras da mistura de

alimentação do gás combustível na região de entrada definida (cabeça de entrada) de um reator de oxidação são continuamente analisadas por cromatografia gasosa para detectar um aumento na concentração dos produtos de combustão, tais como, por exemplo, dióxido de carbono, monóxido de carbono e água ou uma diminuição na concentração de hidrocarbonetos combustíveis. Ainda em uma outra modalidade, a região de entrada definida (cabeça de entrada) de um reator de cianeto de hidrogênio enriquecido com oxigênio compreende 100 % de carga de volume de 40 ppi de espuma cerâmica reticulada e também contém pelo menos dois transdutores de pressão de ação rápida (modelos adequados são comercialmente disponíveis da Kulite Semiconductor Products of New Jersey, USA) de maneira a detectar possíveis deflagrações na região de entrada definida e a iniciar automaticamente o encerramento do sistema de reação por meio do sistema de controle de processo distribuído no evento de uma deflagração é detectado.

As modalidades descritas anteriormente da presente invenção que incorporam instrumentação de monitoramento são apenas alguns exemplos e não se destinam a descrever o escopo completo das possíveis configurações que podem ser utilizadas de acordo com a presente invenção. A seleção e especificação da instrumentação de monitoramento e controles de processo associados apropriados, sistemas de segurança e sistemas lógicos de travamento estarão na capacidade de um versado na técnica no projeto e instrumentação de processo químico, dado o benefício da presente descrição.

Figura 2 mostra uma vista plana superior esquemática transversal da região de entrada definida 20 do reator tubular 10 da figura 1, tomada ao longo da linha A-A e olhando na direção das setas. A placa perfurada 14 e a pluralidade de tubos 12a, 12b, 12c, 12d são visíveis nesta vista. É nesta região de entrada definida que os reagentes e outros alimentados no reator tubular 10 todos entram em contato um com o outro antes de entrar nos tubos 12a, 12b, 12c, 12d e entrar em contato com os materiais de

catalisador S nele para começar uma ou mais reações químicas nos tubos 12a, 12b, 12c, 12d. Dependendo dos reagentes e outros materiais alimentados no reator 10, gás combustível pode estar presente na região de entrada definida 20, que é suscetível de ignição negligente de quaisquer inúmeras fontes incluindo, mas sem limitações, pontos quentes gerados próximos à placa perfurada 14 e centelhas geradas por fricção ou contato com outro aparelho presente na região de entrada definida 20. Da forma discutida anteriormente, tal ignição pode se tornar um evento de deflagração que pode, por sua vez, propagar até que ele transite para detonação ou explosão.

Verificou-se que deflexão e fragmentação da onda de pressão de deflagração podem diminuir a propagação da onda de pressão e abaixar a pressão máxima atingida pela deflagração suficientemente para finalizar o evento de deflagração geral e prevenir a transição para detonação e reduzir a pressão de pico ($P_{\max}$) alcançada. Além disso, verificou-se que deflexão e fragmentação bem sucedidas da onda de pressão de deflagração podem ser alcançadas selecionando e colocando materiais de atenuação adequados em uma região definida em que combustão e deflagração são prováveis de ocorrer, tal como na região de entrada definida 20 do reator tubular 10. Conforme será discutido em mais detalhe daqui em diante, materiais de atenuação “adequados” significa materiais de atenuação selecionados com base na sua geometria, que incluem tanto tamanho quanto forma, com relação ao tamanho e forma da região definida.

Por exemplo, Figura 3A é uma vista lateral em elevação transversal esquemática da região de entrada definida vazia 20, isto é, sem nenhum material de atenuação colocado nela, que correlaciona materiais de atenuação que ocupam 0 % do volume da região de entrada definida 20. Da forma descrita anteriormente, a região de entrada definida 20 é mostrada ligada pela chapa do tubo de entrada 14 e a cabeça do reator 24. Conforme será descrito em mais detalhe daqui em diante, a figura 3B mostra uma

modalidade da presente invenção em que a região de entrada definida 20 da figura 3A contém material de atenuação que compreende componentes de esfera cerâmica 28 e fornece um volume de preenchimento de pelo menos 20 % em volume da região de entrada definida 20.

5 Em casos como os mostrados na figura 3B, onde a região de entrada definida 20 é localizada no topo do vaso de processo e o vaso de processo é um reator tubular com tubos verticais paralelos, é conveniente instalar uma barreira, tal como uma malha cerâmica ou película de tela de fio 30, através da área transversal (ver, por exemplo, Figura 2) da região de
10 entrada definida 20 para prevenir que os componentes 28 do material de atenuação entrem nos tubos 12a, 12b, 12c, 12d por meio da película do tubo perfurada 14 (ver, por exemplo, Figura 1). O uso da barreira 30 é especialmente benéfica em virtude de ela permitir que um espaço vazio, ou “região vazia”, seja mantido na seção mais superior de cada um dos tubos
15 12a, 12b, 12c, 12d, onde as extremidades do tubo passam através da primeira película do tubo 14. Em virtude da espessura tipicamente grande da película do tubo 14, em tais reatores tubulares usados para reações de oxidação, existe resfriamento limitado nesta seção mais superior de cada tubo. Assim, se esta
20 região contivesse material de atenuação, catalisador de oxidação ou mesmo materiais diluentes inertes, ela estaria sujeita a superaquecimento que pode, finalmente, causar falha da conexão fundida entre o tubo e película do tubo 14. Além do custo de reparos, tal falha da conexão fundida entre o tubo e película do tubo 14 também pode resultar no vazamento de sal de resfriamento do lado do casco do reator tubular 10 na região de entrada
25 definida 20 formada pela cabeça do reator 24. Da forma discutida no pedido de patente U.S. No. 200610292046, a liberação do sal de resfriamento tipicamente compreende nitratos e nitritos (por exemplo, sal de HITEC comercialmente disponível da DuPont of Wilmington, Delaware, USA) na região de entrada definida 20 e as subsequentes reações de decomposição que

ocorrem, culminarão na autoignição indesejável do gás de alimentação do reator de oxidação de propileno.

Em uma modalidade da presente invenção (não mostrada *per se*), para formar uma barreira adequada 30, uma camada de 50-milímetros (“mm”) (2-polegadas) de espessura, (40 poros por polegada (“ppi”)) telhas de espuma cerâmica reticuladas são colocadas diretamente na chapa do tubo de entrada de um reator tubular de oxidação de propileno de fluxo descendente para formar uma barreira contínua que cobre a área transversal total da película do tubo, prevenindo que qualquer material de atenuação não funcione nas extremidades dos tubos. Uma região de vazios, isto é, sem nenhum material e que é equivalente no comprimento à espessura do reator chapa do tubo de entrada é, desta forma, mantida nas extremidades do tubo superiores de cada tubo de reator, de maneira tal que o superaquecimento das conexões fundidas entre os tubos e película do tubo seja evitado. Material de atenuação (não mostrado) compreendendo esferas de suporte DENSTONE 2000 de 13 mm (1/2-polegada) (comercialmente disponível da Saint-Gobain Norpro of Stow, Ohio, USA, formalmente conhecido e agora incorporado a Norton Chemical Process Products Corp.) é então colocado na região de entrada definida, no topo desta barreira, para atenuar a pressão de deflagração de acordo com a presente invenção. Em uma modalidade como esta, as telhas de espuma cerâmica reticulada podem ser consideradas parte do material de atenuação, junto com as esferas DENSTONE. O material de atenuação, neste caso a espuma cerâmica e as esferas, devem ocupar pelo menos 20 %, por exemplo, pelo menos 25 % ou ainda pelo menos 30 % ou pelo menos 50 % do volume total da região de entrada definida 20, em que o volume ocupado pelo material de atenuação é a soma do volume dos componentes do material de atenuação e os volumes dos espaços vazios entre eles. Em outras palavras, uma quantidade de material de atenuação é colocada na região definida que fornece pelo menos 20 % volume de preenchimento na região definida.

Em particular, mas sem ficar preso à teoria, contrário ao entendimento comumente mantido na técnica a mistura e maior turbulência de gases combustíveis devem ser evitadas durante a deflagração em virtude de elas acelerarem a propagação da frente da chama e aumentarem a pressão de pico alcançada e, desta forma, apressarem a transição para detonação, verificou-se que o aumento da mistura lateral do gás combustível, minimizando ao mesmo tempo a mistura axial, serve para defletir e fragmentar a onda de pressão e, desta forma, remove energia da deflagração suficiente para abaixar a pressão máxima atingida, diminuindo a propagação da onda de pressão e frente da chama e prevenindo a transição para detonação. “Mistura axial” é a mistura que aumenta a turbulência na direção axial, que é a direção em que a onda de pressão e frente da chama estão se propagando, enquanto que “mistura lateral” é a mistura que aumenta a turbulência do gás combustível em direções a não ser axialmente, por exemplo, sem limitação, substancialmente perpendicular à direção axial. Observou-se que tal mistura lateral é desejavelmente maior a medida em que materiais de atenuação sólidos ou tortuosamente porosos que têm menores diâmetros efetivos são usados, entretanto, esta preferência por materiais menores é limitada um pouco pela necessidade de evitar uma queda de pressão muito grande na produção dos reagentes que ocorre quando materiais muito pequenos são usados. Por exemplo, areia pode fornecer excelente atenuação e fragmentação de uma onda de pressão, mas ela também causará uma enorme e, no geral, inaceitável queda de pressão durante a operação normal do reator e, desta forma, tipicamente não seria uma boa escolha como o único material de atenuação.

Também contrário ao entendimento amplamente mantido por versados na técnica relevante que a chave para a proteção de deflagração, detonação e explosão é a transferência e remoção de calor, observou-se que deflexão e fragmentação bem sucedidas da onda de pressão de deflagração,

que finalmente reduz a intensidade do evento de deflagração e evita a detonação, em vez de ser totalmente controladas pelas forças de transferência de calor também depende altamente: (1) da forma e tamanho, isto é, da geometria dos componentes do material de atenuação colocados na região definida contendo gás combustível e (2) das dimensões da região definida em si. Assim, surpreendentemente, determinou-se que o material de construção dos componentes do material de atenuação (e desta forma sua condutividade térmica associada) é menos importante que sua geometria com relação à atenuação da pressão de deflagração máxima alcançada depois da ignição, P_{max} . Alguns materiais metálicos que foram adotados seriam finalizadores de deflagração e preventivos de detonação bem sucedidos efetivamente desenvolvidos mais fracos em comparação aos materiais não metálicos de forma e tamanho mais apropriados. Além disso, algumas geometrias mostraram ser significativamente mais efetivas que outras, por exemplo, geometrias que apresentam caminhos axiais mínimos por meio dos quais gases combustíveis podem passar (por exemplo, esferas sólidas), ou apresentam caminhos mais tortuosos e axiais mais curtos (material de malha de arame firmemente enrolado de espuma reticulada), tendem a defletir e fragmentar as ondas de pressão de deflagração melhor que materiais tendo geometrias que apresentam caminhos axiais abertos, estendidos quando colocados na região definida contendo o gás combustível (por exemplo, cilindros de anéis ocos).

Geralmente, entende-se que a minimização dos caminhos axiais pode ser alcançada, pelo menos em parte, maximizando o fator de recheio e/ou minimizando o espaço vazio (intersticial) volumétrico entre os componentes do material de atenuação colocados na região definida de um vaso de processo, que é adicionalmente conhecido como dependente da geometria particular (tamanho e forma) do material de atenuação e seus componentes. A determinação e cálculos dos fatores de recheio e espaço

vazio volumétrico estão de acordo com os versados na técnica com referência a textos e tratados básicos. Por exemplo, dados de densidade aparente & fração vazia podem ser medidas empiricamente (carregar um volume fixo com material, determinar a massa do material usado e então dividir pela densidade de uma partícula única para verificar quanto espaço livre está incluído em uma base em %). Entretanto, muitos componentes adequados são materiais comercialmente disponíveis usados como material de recheio de coluna de separações ou de leito de transferência de calor oxidante térmico regenerativo e fornecedores livremente publicam estes dados para tais materiais. Adicionalmente, existem muitos textos de referência que discutem os materiais de recheio mais comuns e dados de fração de recheio associados podem ser consultados (vs. calculado) - ver, por exemplo, Tabela 23-1 (página 710) de Unit Operations of Chemical Engineering, 3ª Ed., W. L. McCabe e J.C. Smith, 1976, McGraw-Hill, New York.

O grau de sucesso obtido por um tipo particular de material de atenuação, tendo uma geometria e material de construção selecionados, é estimado, pelo menos em parte, por sua capacidade de diminuir a pressão máxima ($P_{\max}$) atingida por uma onda de pressão de deflagração em gás combustível em uma região definida de outra forma vazia, comparada à pressão máxima atingida no gás combustível nas mesmas condições operacionais na mesma região definida quando preenchida com o material de atenuação. O exemplo 1 a seguir fornece dados que mostram que anéis Pall de 2-polegadas (50,8 mm) colocados em uma região definida surpreendentemente aumentaram, em vez de diminuir, a pressão de deflagração máxima atingida pelo gás combustível inflamado na região definida, comparado a uma região definida vazia. Os resultados dos experimentos descritos no exemplo 1 também demonstram que camadas de malha de arame ondulada na região definida, que parecem ter fornecido uma área superficial total significativamente maior, consistentemente diminuem a

pressão de deflagração máxima depois da ignição do gás combustível, mas notavelmente falham em extinguir a combustão por meio de mecanismos de remoção de calor.

Figuras 4A-4C e 5A-5J são cada uma série de imagens gráficas produzidas por software de modelo de computador, mostrando a progressão de uma frente da onda de pressão de deflagração (PWF), em vários intervalos de tempo não excedendo um tempo transcorrido total de 200 microssegundos, começando com ignição em um único ponto (P) em uma região definida (DR). A região definida é a região de entrada em forma de domo de um vaso de reator tubular (tal como discutido anteriormente com relação às figuras 1-3). As imagens das figuras 4A-4C e 5A-5J mostram a região definida de uma vista lateral, similar à fornecida nas figuras 3A & B. A sombra da onda de pressão varia com a pressão, de maneira tal que a cor cinza mais escura de uma porção de uma onda de pressão indique uma maior pressão localizada que em outras porções da onda de pressão. Por exemplo, na figura 4B pode-se ver que a borda de avanço (PWF) da frente da onda de pressão de deflagração é uma sombra cinza mais escura comparada à sombra ligeiramente mais clara, mas não particularmente clara, de cinza vista atrás da frente de avanço e próxima do ponto de ignição (P).

Em particular, a série de imagens nas figuras 4A-4C mostra a progressão de uma frente da onda de pressão de deflagração (PWF) do ponto de ignição (P) na região definida (DR) não contendo nenhum material de atenuação. Em um vaso vazio, a frente da onda de pressão de deflagração propaga através do vaso vazio, estavelmente em todas as direções longe do ponto de ignição, da forma mostrada nas figuras 4A-4C, pela borda de avanço semicircular do PWF. Figuras 5A-5J mostram a progressão de uma deflagração (PWF) do ponto de ignição (P) na região definida (DR), mas a região definida (DR) agora contém material de atenuação compreendendo esferas cerâmicas (CS). Revendo as figuras 5A-5J pode-se ver que a frente da

onda de pressão de deflagração ainda continua externamente em todas as direções do ponto de ignição, mas que a frente da onda macia, contínua, semicircular é defletida e fragmentada quando entra em contato com o material de atenuação. Mesmo que uma pressão de deflagração máxima ($P_{\max}$) ainda seja alcançada quando o material de atenuação é usado, a $P_{\max}$ alcançada é menor que a $P_{\max}$ alcançada pela deflagração no vaso de teste vazio. Também pode-se ver que a propagação da frente da onda de pressão de deflagração leva muito pouco tempo – na ordem de poucos centésimos de microssegundos. Isto indica que a deflexão lateral da onda de pressão de deflagração por algum tipo de material de atenuação compreendendo componentes sólidos diminui a pressão máxima finalmente alcançada pela onda de pressão.

Da forma previamente estabelecida, observa-se que uma característica mais relevante que transferência de calor impacta na capacidade do material de atenuação de fragmentar a onda de pressão de deflagração suficientemente para evitar a detonação: a geometria dos componentes do material de atenuação, com relação à forma e tamanho da área definida do vaso de processo. O “diâmetro efetivo” é uma característica quantificável do material de atenuação tendo uma pluralidade de componentes, tais como esferas cerâmicas, ou anéis de Pall etc., que foi desenvolvida pelos inventores para quantificar o perfil transversal de cada componente do material de atenuação disponível para impedir a propagação da frente da onda de pressão durante a deflagração. Sem ficar limitado à teoria, o “diâmetro efetivo,” da forma aqui usada, é análogo ao conceito de “diâmetro hidráulico” que é conhecido pelos versados na técnica de projeto de controle de chama. O conceito de diâmetro hidráulico fornece maior para quantificar o efeito da geometria e área superficial de tubulações e condutos não circulares com relação à remoção de energia térmica de fluidos que fluem através deles. Similarmente, o conceito de “diâmetro efetivo” foi desenvolvido para

fornecer quantificação análoga dos efeitos da geometria do material de atenuação tendo componentes não esféricos na propagação de uma frente de onda de pressão através deles, comparados, no geral, a componentes esféricos, que apresentam um perfil transversal consistentemente circular como um impedimento para a propagação da onda de pressão.

“Componentes geralmente esféricos” significa componentes com uma geometria exterior que, quando inscrita em uma esfera, ocupa mais que cerca de 50 % do volume total da esfera (= razão de volume inscrito > 0,50). Por exemplo, no caso de um cubo, a razão de volume inscrito é cerca de 0,68 e para um cilindro DENSTONE com L:D aproximadamente igual [(por exemplo, L = 0,375 polegada (0,95 cm): D = 0,25 polegada (0,63 cm), volume = 0,0184 polegada cúbica (0,30 cm³); Ds=1,14 cm, então o volume da esfera = 0,0479 polegada cúbica (0,78 cm³); & razão é então 0,0184/0,0479 = 0,3840], ele é cerca de 0,38. O cálculo matemático da razão de volume inscrito pode ser prontamente realizado pelos versados na técnica em geometria e trigonometria. Tais cálculos são certamente simplificados quando a geometria da partícula envolvida inclui um ou mais eixos de simetria, tal como ocorre com sólidos de revolução. No caso de partículas multifacetadas que remontam poliedro regular, a forma de superfície começa a se aproximar de uma esfera a medida em que o número de faces aumenta e a razão de volume inscrito aproxima de 1.

O “diâmetro efetivo” dos componentes do material de atenuação, da forma que este termo é aqui usado, significa o diâmetro médio de uma esfera em que um único componente médio é inscrito. “Diâmetro efetivo igual” significa um diâmetro efetivo que é numericamente o mesmo em uma tolerância de medição de cerca de + 1- 5 %, por exemplo, ou ainda 10 % ou 20 %.

Requerentes verificaram que tanto a geometria quanto diâmetro efetivo dos componentes que atenuam a pressão individual (por

exemplo, geometria do componente), bem como a ordem ou embalagem destes componentes com relação um ao outro podem afetar o grau de atenuação de pressão alcançado em um vaso de processo particular. De uma maneira geral, quanto menor o diâmetro efetivo dos componentes, maior a atenuação da pressão. Adicionalmente, requerentes observaram que múltiplas camadas dos componentes de material de atenuação produzem um grau maior de atenuação da pressão de deflagração que uma única camada dos componentes e que a maior atenuação é possível quando a maioria da área definida do vaso de processo é preenchida com material de atenuação.

No caso onde múltiplas camadas de partículas são usadas para atenuar a pressão de deflagração com um vaso de processo, prefere-se que as múltiplas camadas de tais partículas sejam organizadas em uma geometria de volume bem ordenada que minimiza “canalização.” Canalização significa desenvolvimento de fluxo relativamente não construído do fluido ao longo do caminho em uma configuração de obstáculos ou equipamento que apresentam caminhos de passagem pelo menos semicontíguos através dos quais o fluido pode facilmente e estavelmente fluir, em vez de ser defletido ou atrapalhado.

Em um caso ideal, somente partículas perfeitamente macias, uniformemente esféricas exatamente do mesmo diâmetro devem ser usadas, em virtude de tais partículas se automontarem ou “auto-ordenarem” em uma geometria de volume com orientação cúbica centrada na face uniforme. Este comportamento de auto-ordenação é desejável em virtude de fornecer o benefício de uma geometria de volume bem ordenada, apresentando pouca ou nenhuma abertura contígua através da qual o fluido pode fluir, sem a necessidade de ajuste manual significativo dos componentes. Materiais de atenuação cujos componentes tendem a ser de auto-ordenação possibilitam o preenchimento eficiente de um vaso simplesmente vertendo ou despejando material de atenuação na área definida do vaso de processo.

Felizmente, requerentes verificaram que o material de

atenuação compreende, no geral, componentes esféricos de diâmetro efetivo igual que se aproxima deste comportamento de esfera ideal muito bem, com partículas que têm maiores razão de volume inscrito mais intimamente se aproximando deste comportamento de esfera ideal.

5 Assim, conforme será descrito daqui em diante em mais detalhe, é possível agora para versados na técnica realizar as etapas de: selecionado um material particulado de um dado tamanho, verificando seu desempenho da atenuação da pressão em uma esfera de teste de laboratório e então colocando este material exato (da forma testada) em um vaso de
10 processo muito maior, em escala comercial para obter o benefício de atenuação da pressão de deflagração.

No caso onde são utilizados materiais de atenuação compreendendo, no geral, partículas esféricas de igual diâmetro efetivo, pode ser desejável utilizar material de atenuação com componentes de tamanho
15 maior que os testados no aparelho do laboratório. Isto se dá em virtude de a queda de pressão de um dado fluxo de gás através de uma coleção de componentes poder ser minimizada quando o diâmetro efetivo dos componentes é maior. Alta queda de pressão requer maior pressurização do gás alimentado no vaso de processo (por meio, por exemplo, do uso de um
20 sistema de compressão de gás), que é caro. Além do mais, maior pressurização das alimentações de gás tem um efeito adverso nos limites de inflamabilidade e temperatura de autoignição do sistema. Infelizmente, o objetivo de minimizar a queda de pressão é diretamente oposto ao objetivo de maximizar a atenuação da pressão por meio do uso de pequenas partículas (da
25 forma estabelecida anteriormente) e se torna difícil na prática refinar esta situação sem realizar um número proibitivamente grande de testes de laboratório caros.

Felizmente, investigações extensivas dos requerentes mostrou inesperada e surpreendentemente que é possível prever o comportamento do

material de atenuação compreendendo componentes com um diâmetro efetivo diferente dos componentes do material de atenuação realmente testado no laboratório. Mais particularmente, o método da presente invenção foi desenvolvido, com o qual versados na técnica podem realizar relativamente poucos testes de laboratório e então extrapolar os resultados para selecionar diâmetros efetivos apropriados para os componentes do material de atenuação em vasos de grande escala comercial. Este método envolve a determinação do fator de mistura de deflagração (DMF) para dadas geometrias de partícula.

O DMF fornece uma base para identificar o diâmetro efetivo máximo que pode ser usado em um dado vaso de processo de maneira a obter atenuação da pressão de deflagração. Sem um método como este, seria necessário construir sistemas de teste em escala total no laboratório de maneira a se obter esta informação. Dado que muitos vasos de podem ter 20 ou mais pés (6,1 ou mais metros) de diâmetro, uma abordagem de teste como esta é impraticável. Neste exemplo, bolas de cerâmica sólidas, ocas de 3,6 polegadas (9,14 centímetros) de diâmetro podem ser efetivamente usadas em um vaso comercial tendo um diâmetro de 22 pés (6,7 metros), com base no teste bem sucedido de esferas DENSTONE de $\frac{1}{4}$ de polegada no vaso de teste de laboratório de 10 litros. Exatamente como a pressão de deflagração máxima, $P_{\max}$, de um vaso vazio depende do estágio inicial da composição, temperatura e pressão do gás combustível na região definida do vaso de processo, assim também é a relação do valor DMF em função de $P_{\max}$ para um dado componente de material de atenuação. Entretanto, uma vez que o estágio inicial da composição, temperatura e pressão do gás combustível no vaso de processo é fixo, a relação de DMF em função de $P_{\max}$ também é fixa.

Torna-se evidente com base nos exemplos fornecidos daqui em diante, em que uma mistura de gás combustível compreendendo propileno a 35 libras por polegada quadrada (“psig”) (0,24 mPa) e 225 °C (437 °F) foi usado, que partículas com um DMF maior que cerca de 14 não fornecerão

atenuação da pressão de deflagração significativa para manter a pressão de pico abaixo da pressão do vaso permitida máxima desejada e então não devem ser selecionadas.

O método da presente invenção foi desenvolvido para uso com materiais de atenuação tendo, no geral, componentes esféricos de diâmetro efetivo igual. Acredita-se que o método mais preciso prevê comportamento de atenuação da pressão quando a razão de volume inscrito é alta e, desta forma, prefere-se usar materiais de atenuação tendo componentes com uma razão de volume inscrito $> 0,3$ (cilindro DENSTONE), mais preferivelmente, componentes com uma razão de volume inscrito $> 0,6$ (cubo), ou mesmo componentes com uma razão de volume inscrito $> 0,9$ (esferas DENSTONE).

Também determinou-se que o método pode ser efetivamente usado com material de atenuação compreendendo componentes de espuma cerâmica reticulados, em que o diâmetro do tamanho de poro médio é substituído pelo diâmetro efetivo de um componente esférico. Por exemplo, espuma cerâmica com uma porosidade nominal de 20 poros por polegada ("ppi") teriam um diâmetro efetivo de 1,27 mm (25,4 mm / 20).

O método também será razoavelmente efetivo na previsão do comportamento de um material de atenuação compreendendo uma mistura de geralmente dois componentes esféricos, tais como, por exemplo, esferas DENSTONE e cilindros DENSTONE. Se os diâmetros efetivos dos dois tipos de componentes forem os mesmos, a mistura aproximará o desempenho de um material de atenuação tipo componente único e a exatidão da previsão será melhor em menores diâmetros efetivos.

Em uma modalidade onde geralmente dois componentes esféricos de diferentes diâmetros efetivos são utilizados para o material de atenuação, prefere-se que a razão dos diâmetros do componente ($D_{\text{grande}}/D_{\text{pequeno}}$) seja pelo menos 100, por exemplo, pelo menos 1.000. Diferenças nos diâmetros podem impactar negativamente a ordem das

camadas do componente, criando lacunas tipo canal na região de interface entre duas partículas (de tamanhos diferentes) adjacentes, que certamente diminui a atenuação da pressão local na região. A medida em que a diferença de tamanho aumenta, o componente de diâmetro grande começa a ter menos efeito prejudicial na atenuação da pressão, em virtude de as menores partículas poderem mais facilmente juntar nas regiões de interface entre as partículas de diâmetro grande. No limite de diferenças de tamanho muito grandes, o raio do componente grande de curvatura se torna insignificante na região da interface e a geometria do componente grande é equivalente à parede do vaso relativo aos componentes pequenos adjacentes. Esta abordagem de usar “partículas” de tamanhos muito diferentes é especialmente valiosa quando o preenchimento de todo o volume com partículas pequenas é um problema (por exemplo, onde componentes são tão densos que limitações de peso máximo para o vaso de processo excedem) e o maior componente tem uma densidade menor que a densidade do componente pequeno, tal como onde o maior componente é oco.

Observa-se que outras estruturas internas grandes, tais como mantas de fibra de cerâmica ou o inserto cônico descrito na patente U.S. No. 6.649.137 (ver figura 20), podem ser colocadas na área definida do vaso de processo, junto com materiais de atenuação adequados, de acordo com o método da presente invenção. O uso de outras estruturas internas grandes reduz o volume da região definida do vaso de processo, reduzindo assim a quantidade de material de atenuação necessária para preencher a região definida e, por sua vez, diminui o peso total dos materiais adicionados à área definida, obtendo ainda ao mesmo tempo um grau efetivo de atenuação da pressão de deflagração.

Em um aspecto da presente invenção, um método é fornecido para atenuar a pressão de deflagração produzida pela combustão de gás combustível em uma região definida de um vaso de processo. Por exemplo,

sem limitação, o vaso de processo pode ser, da forma mostrada na figura 1, um reator de casco e de tubo usado para oxidação catalítica de hidrocarbonetos e a região definida podem ser a região de entrada do reator, ligada pela cabeça do reator 24 e primeira película do tubo 14. O vaso de processo tem uma pressão de contenção permitida máxima, $P(c)$ (frequentemente fornecida pelo fabricante como parte das especificações do projeto e de operação) e a região definida tem um raio transversal, $R(v)$. O vaso de processo é operado em condições operacionais conhecidas que compreendem composição de gás de alimentação, temperatura e pressão iniciais. A composição de gás de alimentação inicial pode adicionalmente compreender uma mistura inflamável de hidrocarbonetos e oxigênio nas ditas condições operacionais. Depois da ignição do gás combustível, uma onda de pressão de deflagração propaga e atinge uma pressão de pico $P(max)$ na região definida. No geral, a pressão de deflagração resultante da ignição dita anteriormente é atenuada selecionando e colocando o material de atenuação adequado na região definida do vaso de processo. O material de atenuação adequado mantém sua forma física em condições operacionais do processo e tem uma pluralidade de componentes. Os componentes do material de atenuação têm um diâmetro efetivo e também podem ter uma geometria.

A primeira etapa do método de acordo com a presente invenção é determinar o diâmetro efetivo máximo dos componentes do material de atenuação que é adequado para uso na região definida do vaso de processo em que um gás combustível particular estará presente. Isto é realizado desenvolvendo dados empíricos compreendendo pares associados de pressões de deflagração de pico e fatores de mistura de deflagração, que demonstra uma relação linear entre uma pluralidade de materiais de atenuação, pelo menos um dos quais tem componentes com um diâmetro efetivo que difere dos diâmetros efetivos dos componentes dos outros materiais de atenuação e as pressões de pico alcançadas depois da ignição do

gás combustível tendo a mesma composição que a composição de gás de alimentação inicial.

Mais particularmente, os dados empíricos compreendendo pares associados de pressões de deflagração de pico ($P_{\max}$) e fatores de mistura de deflagração (DMF) são desenvolvidos realizando múltiplos testes experimentais usando uma esfera de teste e um gás combustível de composição conhecida, consistente e condições fixas de temperatura e pressão de gás combustível iniciais, para cada experimento. A esfera de teste tem um raio, $R(ts)$ e é equipada com sensores e detectores para coletar e registrar dados de temperatura e pressão durante os testes experimentais. Durante cada teste experimental, a esfera de teste é preenchida com o gás combustível, em condições operacionais conhecidas, tais como pressão e temperatura iniciais e então o gás combustível é inflamado. O gás combustível pode compreender, por exemplo, sem limitação, um ou mais hidrocarbonetos e oxigênio. A pressão de deflagração máxima ou de “pico” alcançada durante a deflagração é medida e registrada para cada teste experimental. Inicialmente, a esfera de teste não contém nenhum material de atenuação quando o gás combustível é alimentado na esfera de teste e inflamado. A pressão de deflagração de pico, $P_{\max}(0)$, resultante da ignição do gás combustível na ausência de qualquer material de atenuação é registrada e a esfera evacuada na preparação para o próximo teste experimental.

Pelo menos dois testes experimentais subsequentes são conduzidos com a esfera de teste sendo carregada com a mesma composição de gás combustível, mas com diferentes materiais de atenuação na esfera de teste para cada teste. A pressão de deflagração de pico é registrada para cada material de atenuação testado. Mais particularmente, a esfera de teste é carregada com um primeiro material de atenuação selecionado tendo um primeiro diâmetro efetivo, $D_s(1)$, então o gás combustível é fornecido e inflamado, depois do qual uma primeira pressão de deflagração de pico,

$P_{\max}(1)$, associada a um primeiro material de atenuação selecionado, é registrada. Pelo menos um teste mais experimental é conduzido em que a esfera de teste é carregada com um segundo material de atenuação selecionado tendo um segundo diâmetro efetivo $D_s(2)$, então o gás combustível é fornecido e inflamado, depois do qual uma segunda pressão de deflagração de pico, $P_{\max}(2)$, associada ao segundo material de atenuação selecionado, é registrada. Se desejado, testes experimentais adicionais podem ser realizados, usando tipos adicionais de materiais de atenuação com diferentes diâmetros efetivos. Conforme será facilmente entendido por versados na técnica, testes experimentais adicionais fornecerão dados empíricos adicionais, que seriam esperados para fornecer um modelo mais robusto e confiável para determinar o tipo e tamanho de material de atenuação para usar em um vaso de processo de escala industrial real, mas para produzir um modelo linear, tal como o aqui utilizado, um mínimo de dois pontos de dados é requerido. Certamente, os mesmos dados podem ser obtidos testando um material de atenuação de uma geometria específica, repetidamente em esfera de testes de volume variado (por exemplo, tendo raios diferentes), por exemplo, uma esfera de teste de 5 litros, uma outra de 10 litros e uma outra de 20 litros de volume.

Certamente, conforme será prontamente percebido por um versado na técnica, se o $P_{\max}$ resultante do primeiro teste experimental usando material de atenuação demonstra que o material de atenuação particular testado fornece suficiente redução na $P_{\max}$, de maneira tal que a $P_{\max}$ seja menor que a pressão do projeto do vaso de processo em que ele deve ser usado, então não é estritamente necessário realizar testes adicionais com materiais de atenuação diferentemente classificados. Ao contrário, estes resultados suportariam a conclusão que material de atenuação, tendo a mesma geometria e diâmetro efetivo que o material testado no primeiro teste experimental, seria adequado para disposição na região definida do vaso de

processo para atenuar a pressão de deflagração nele, de acordo com a presente invenção. Assim, o material de atenuação da mesma geometria e diâmetro efetivo que o material testado pode ser colocado na região definida em uma quantidade que fornece pelo menos 20 % de volume de preenchimento.

- 5 Existirá uma queda de pressão através da região definida como um resultado da disposição dos materiais de atenuação nela, entretanto, se a quantidade de queda de pressão for aceitável, então teste experimental adicional pode ser evitado.

Observou-se que a extensão da atenuação da pressão de
10 deflagração depende da quantidade de material de atenuação usado (isto é, a porcentagem de volume de preenchimento na região definida); assim, a maior redução na $P_{\max}$ para qualquer dado material de atenuação será obtida quando 100 % do volume de preenchimento do material de atenuação específico for usado. Da forma observada no exemplo 3, o uso de menos que cerca de 20 %
15 de volume de preenchimento fornece pouca, se alguma, redução mensurável na $P_{\max}$ e não é recomendada. Desta forma, ficará aparente para um versado na técnica, dado o benefício da presente descrição, que quando múltiplos testes experimentais são realizados para criar um modelo linear, tal como o descrito anteriormente, um modelo mais robusto e confiável será obtido se
20 todos os experimentos forem realizados usando a mesma porcentagem de volume de preenchimento na esfera de teste. Adicionalmente, se for desejado utilizar o método da presente invenção com menos que 100 % de volume de preenchimento de material de atenuação no vaso de processo, é recomendado que o teste experimental seja realizado usando a quantidade equivalente de
25 material de atenuação na esfera de teste. Por exemplo, se for desejado utilizar um 50 % de volume de preenchimento de um dado material de atenuação em um dado vaso de processo, o teste experimental deve ser realizado com um equivalente de 50 % de volume de preenchimento na esfera de teste de maneira a se obter os dados experimentais mais representativos para

extrapolação.

Com relação ao material de atenuação, a geometria dos componentes do material de atenuação pode ter, por exemplo, mas sem limitação, um ou mais das seguintes formas: esférica, oval, cilíndrica, de sela, de bloco, alongada e poliédrica e devem ter pelo menos uma característica selecionada do grupo que consiste em: sólido, oco, poroso e tendo pelo menos uma passagem principal. Além disso, o material de atenuação pode ser feito de pelo menos um tipo de material selecionado do grupo que consiste em: cerâmico, mineral, metal e polímero. Além disso, pode ser mais informativo selecionar o primeiro e segundo materiais de atenuação, de maneira tal que a geometria, em particular, o diâmetro efetivo ($D_s(1)$), dos componentes do primeiro material de atenuação selecionado seja diferente da geometria, isto é, o diâmetro efetivo ($D_s(2)$), dos componentes do segundo material de atenuação.

Em seguida, para cada pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(0)$, $P_{\max}(1)$, $P_{\max}(2)$... $P_{\max}(n)$, onde “n” é o número total de testes experimentais realizados com a esfera de teste), um fator de mistura de deflagração correspondente ($DMF(0)$, $DMF(1)$, $DMF(2)$, .. $DMF(n)$, onde “n” é o número total de testes experimentais realizados) é calculado usando a seguinte fórmula:

$$DMF(n) - (D_s(n)/R(ts)) \times 40$$

em que $n = 0, 1, 2 \dots n$ e $D_s(n)$ e $R(ts)$ são cada um medidos em centímetros.

Agora que um conjunto de dados bivariados (x, y) foi desenvolvido, o a relação linear aproximada entre a pressão de deflagração de pico $P_{\max}(n)$ e o fator de mistura de deflagração $DMF(n)$ para materiais de geometria similar, mas diferentes diâmetros efetivos pode ser determinado (isto é, linearização) usando a técnica algébrica, bem conhecida pelos versados na técnica, que requer resolver a seguinte equação, com base nos

pares de dados, para determinar os valores constantes para as variáveis M e B:

$$P_{\max}(n) = M \times \text{DMF}(n) + B$$

em que $n = 0, 1, 2 \dots n$.

Uma vez que os valores das constantes B e M foram calculadas e, conhecendo-se a pressão de contenção máxima permitida (P(c)) do vaso de processo da informação do projeto do fabricante, o fator de mistura de deflagração máximo (DMF(a)) que pode estar contido no vaso de processo é calculado usando os valores conhecidos de B, M e (P(c)):

$$\text{DMF}(a) = [P(c) - B] / M.$$

Finalmente, o diâmetro efetivo máximo (Ds(A)) dos componentes do material de atenuação esperado para atenuar com êxito a pressão de deflagração suficientemente para reduzir a pressão máxima alcançada ($P_{\max}$) e evitar a detonação na região definida do vaso de processo, pode ser calculado usando a seguinte relação matemática:

$$Ds(a) = [\text{DMF}(a) \times R(v)] / 40; e$$

Conhecendo o diâmetro efetivo máximo (Ds(a)) para os componentes do material de atenuação, um material de atenuação adequado para o vaso de processo particular à mão é selecionado, em que os componentes do material de atenuação têm um diâmetro efetivo menor ou igual ao diâmetro efetivo máximo calculado (Ds(a)). O material de atenuação selecionado é colocado na região definida do vaso de processo, de uma maneira que minimiza espaços vazios e caminhos abertos entre os componentes. O material de atenuação deve ocupar pelo menos 20 % em volume da região definida, por exemplo, pelo menos 40 %, ou ainda pelo menos 60 % ou pelo menos 80 %. Da forma discutida anteriormente, alguns materiais de atenuação compreendem componentes que são de auto ordenação quando fornecidos a um vaso ou região definida nele e naturalmente assentam e alinham entre si, de maneira tal que os espaços vazios e os caminhos abertos entre eles sejam razoavelmente uniformes e minimizados. Entretanto, quando

o material de atenuação não é de auto ordenação quando aleatoriamente fornecido na região definida do vaso de processo, a etapa de colocá-los na região definida requer posicionamento manual de cada componente do material de atenuação na região definida para minimizar espaços vazios e caminhos abertos entre os componentes e tornar tais espaços e caminhos o mais uniformes possível.

Conforme será prontamente entendido pelos versados na técnica, a etapa de determinar empiricamente a pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(0)$) pode ser realizada inflamando o gás combustível na esfera de teste, que está de outra maneira vazia, na pressão e temperatura das condições operacionais pré-determinadas e então medindo a maior pressão ($P_{\max}(0)$) alcançada na esfera de teste, depois da ignição. Similarmente, a etapa de determinar empiricamente uma primeira pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(1)$) pode ser realizada inflamando gás combustível na esfera de teste, depois de carregá-la com o primeiro material de atenuação selecionado, na pressão e temperatura das condições operacionais pré-determinadas e então medindo a maior pressão ($P_{\max}(1)$) alcançada na esfera de teste carregada com o primeiro material de atenuação selecionado, depois da ignição. Certamente, a etapa de determinar empiricamente uma segunda pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(2)$) pode ser realizada inflamando o gás combustível na esfera de teste, depois de carregá-la com o segundo material de atenuação selecionado, na pressão e temperatura das condições operacionais pré-determinadas e então medindo a maior pressão ($P_{\max}(2)$) alcançada na esfera de teste carregada com o segundo material de atenuação selecionado, depois da ignição. Pressões máximas ($P_{\max}(n)$) para tipos e tamanhos adicionais (isto é, terceiro, quarto, etc.) de materiais de atenuação são determinadas pelo mesmo método descrito anteriormente.

Em uma outra modalidade da presente invenção, é fornecido um reator tubular que é adaptado para atenuação da pressão de deflagração

resultante da combustão de gás combustível nele. O reator tubular tem, no geral, uma configuração convencional, da forma descrita anteriormente com relação à figura 1, em que ele compreende uma pluralidade de tubos, cada um estendendo-se entre uma primeira e uma segunda placa perfurada, todas as
 5 quais estão encerrados em um casco. O encerramento dos tubos e placas perfuradas pelo casco forma uma região do lado do casco para circulação de fluido em volta da pluralidade de tubos e uma região de lado da reação. A região do lado da reação compreende uma região de entrada definida, ligada em um lado pela primeira placa perfurada e tendo um raio substancialmente
 10 igual ao raio da primeira placa perfurada e uma região de saída definida ligada em um lado pela segunda placa perfurada e tendo um raio substancialmente igual ao raio da segunda placa perfurada. Cada uma da pluralidade de tubos está em comunicação fluídica tanto com a região de entrada definida quanto de saída definida para render fluidos de reação. O reator tubular de acordo
 15 com a presente invenção adicionalmente compreende material de atenuação tendo uma pluralidade de componentes, todos os quais têm uma geometria e que são colocados, de maneira tal que espaços vazios e caminhos abertos entre os componentes sejam minimizados. O material de atenuação ocupa pelo menos 20 %, por exemplo, pelo menos 40 %, ou pelo menos 60 % ou
 20 pelo menos 80 % de pelo menos uma das regiões de entrada definida e a região de saída definida. Além do mais, os componentes do material de atenuação têm um diâmetro efetivo ($D_s(A)$) que satisfaz a seguinte relação matemática:

$$D_s(a) = [DMF(a) \times R(v)] / 40$$

em que $D_s(a)$ está em centímetros, ($DMF(a)$) é o fator de
 25 mistura de deflagração associado ao material de atenuação e que é determinado empiricamente pelo método descrito anteriormente e $R(v)$ está em centímetros e é o raio de qualquer região de entrada ou saída definida ocupada pelo material de atenuação.

Onde o reator tubular é usado para a oxidação catalítica de fase gasosa de hidrocarbonetos C_1 - C_8 , por exemplo, hidrocarbonetos C_3 - C_8 , para produzir seus produtos oxigenados correspondentes incluindo, mas sem limitações, aldeídos insaturados e ácidos carboxílicos insaturados, gás combustível está presente nas regiões definidas. O gás combustível é frequentemente uma mistura de um ou mais hidrocarbonetos C_1 - C_8 e oxigênio, entre outros componentes possíveis, tais como um ou mais produtos oxigenados e materiais inertes. Exemplos de oxidações catalíticas de fase gasosa incluem, mas sem limitações: oxidação de isobutileno a metacroleína ou ácido metacrílico; oxidação de isobutano a metacroleína ou ácido metacrílico; oxidação de butano a anidrido maleico; oxidação de propano a acroleína ou ácido acrílico; oxidação de propileno a acroleína ou ácido acrílico; e amoxidação de metano a cianeto de hidrogênio.

Da forma discutida anteriormente, a geometria do material de atenuação compreende pelo menos uma forma selecionada do grupo que consiste em: esférica, oval, cilíndrica, forma de sela, forma de bloco, alongada e poliédrica e pelo menos uma característica selecionada do grupo que consiste em: sólido, oco, poroso e tendo pelo menos uma passagem principal. Além disso, o material de atenuação compreende pelo menos um tipo de material selecionado do grupo que consiste em: cerâmica, mineral, metal e polímero. Exemplos materiais de atenuação adequados incluem, mas sem limitações: selas cerâmicas, partículas de vermiculita, cilindros compreendendo cobertor de cerâmica FIBERFRAX laminada (material FIBERFRAX é comercialmente disponível da Unifrax of Niagra Falls, New York, USA), bola de gude de vidro, catalisador de oxidação tipo óxido de metal misto usado, partículas de carbonato de cálcio, anéis de Raschig de alumínio, cilindros pré-fundidos compreendendo bolhas de alumina, bolas de bilhar de resina fenólica, bolas de aço inoxidável ocas, telhas de espuma de cobre reticuladas, meio de topo de leito Pentaring (comercialmente disponível

da Saint-Gobain Norpro of Stow, Ohio, USA) e mancais de esfera de carbetto de silício.

Em uma modalidade adicional do reator tubular da presente invenção, dois ou mais materiais de atenuação estão presentes em pelo menos uma das regiões de entrada definida e região de saída definida e pelo menos um dos materiais de atenuação tem componentes com uma geometria diferente da geometria dos componentes do outro material de atenuação.

Em particular, dois ou mais materiais de atenuação podem estar presentes em pelo menos uma das regiões de entrada definida e região de saída definida. Pelo menos um dos materiais de atenuação deve ter componentes com um diâmetro efetivo ($D_s(a)$) que satisfaz a seguinte relação matemática:

$$D_s(a) = [DMF(a) \times R(v)] / 40$$

em que $D_s(a)$ está em centímetros, ($DMF(a)$) é o fator de mistura de deflagração associado ao material de atenuação e que é determinado empiricamente pelo método descrito anteriormente e $R(v)$ está em centímetros e é o raio de qualquer região de entrada ou saída definida ocupada pelo material de atenuação.

A presente invenção também fornece um método para realizar reações em fase gasosa seguramente em condições operacionais inflamáveis, que compreende uma composição de alimentação de gás, temperatura de reação e pressão de reação.

Se condições operacionais inflamáveis existem em qualquer dado sistema de reação, certamente, dependerá de inúmeras variáveis incluindo, mas sem limitações, do tipo de materiais gasosos e suas proporções contidas na composição de alimentação de gás, bem como da temperatura e pressão na qual a reação(s) é/são realizada (isto é, a temperatura de reação e a pressão de reação). Conforme é bem entendido por um versado na técnica, condições operacionais inflamáveis são as na qual existe o potencial para

correntes gasosas contendo gás combustível, tais como alcanos e oxigênio, para inflamar, queimar e/ou explodir quando as concentrações relativas, ou razões, do gás combustível e oxigênio na mesma corrente gasosa não funcionam na região explosiva entre o limite explosivo superior (UEL) e o limite explosivo inferior (LEL), tais limites dependendo dos constituintes particulares das correntes de alimentação, da temperatura e da pressão na qual eles existem nos processos. De maneira a evitar tais contratempos, as quantidades relativas de gás combustível (alcanos, alquenos) e oxigênio nas correntes de alimentação gasosas de tais processos de oxidação são tipicamente mantidos em valores fora da região explosiva, por exemplo, em razões abaixo do LEL ou, alternativamente, acima do UEL. Esta abordagem, entretanto, limita a quantidade de produção de reagente que pode ser empregada durante a reação e, desta forma, também limita a quantidade de produto que pode ser produzido, dependendo da temperatura e pressão requeridas para a reação particular de interesse para proceder em uma taxa economicamente viável. Versados na técnica são bem familiarizados com os vários métodos de determinar se condições operacionais inflamáveis existem para uma composição de alimentação de gás particular, que compreende hidrocarbonetos e oxigênio, em temperatura e pressão de reação particulares. Por exemplo, sem limitação, uma maneira de determinar a inflamabilidade de um sistema de reação particular é realizar medições de laboratório descritas no European Standard DIN EN 1839: Janeiro 2004.

O método da presente invenção para realizar as reações em fase gasosa seguramente em condições operacionais inflamáveis envolve fornecer um vaso de reação que tem uma região definida por meio da qual a composição de alimentação de gás passa e a região definida é pelo menos 20 % em volume ocupada por pelo menos um material de atenuação que mantém sua forma física nas condições operacionais inflamáveis. Este método de realizar reações em fase gasosa adicionalmente envolve fornecer um ou mais

materiais gasosos ao vaso de reação para formar a composição de alimentação gasosa que passa através da região definida do vaso de reação e submeter a composição de alimentação gasosa a uma ou mais reações no vaso de reação, a uma temperatura e pressão na quais a dita composição de alimentação gasosa é inflamável.

Um ou mais materiais gasosos compreendem um hidrocarboneto, um gás contendo oxigênio e, opcionalmente, um ou mais materiais inertes. “Hidrocarbonetos” incluem, por exemplo, sem limitação, alcanos, tais como metano, propano e butano e alquenos, tais como propileno e isobutileno, bem como compostos de hidrocarboneto mais complexos. O termo “gás contendo oxigênio,” da forma aqui usada, significa qualquer gás compreendendo de 0,01 % até 100 % de oxigênio ou compostos contendo oxigênio incluindo, por exemplo, sem limitação: ar, ar enriquecido com oxigênio, óxido nitroso, dióxido de nitrogênio, oxigênio puro, misturas de oxigênio puro ou compostos contendo oxigênio com pelo menos um gás inerte, tais como nitrogênio e misturas destes. Embora o gás contendo oxigênio possa ser gás oxigênio puro, normalmente é mais econômico usar um gás contendo oxigênio, tal como ar, quando a pureza não é particularmente requerida. Também, materiais “inertes” incluem qualquer material que é substancialmente inerte, isto é, não participa, não é afetado, e/ou é inativo, na reação particular de interesse e, por exemplo, pode incluir, mas sem limitações: nitrogênio, vapor, gases nobres e dióxido de carbono.

O material de atenuação pode ser selecionado de acordo com o método da presente invenção descrito anteriormente que envolve realizar testes experimentais para determinar o diâmetro efetivo adequado máximo dos componentes do material de atenuação. O material de atenuação pode ser qualquer tipo de material selecionado do grupo que consiste em: cerâmica, mineral, metal e polímero. Os componentes do material de atenuação cada um tem uma geometria compreendendo pelo menos uma forma selecionada do

grupo que consiste em: esférica, oval, cilíndrica, fio, forma de sela, forma de bloco, alongada e poliédrica e pelo menos uma característica selecionada do grupo que consiste em: sólido, oco, poroso e tendo pelo menos uma passagem principal.

5 Em uma modalidade do método para realizar reações em fase gasosa seguramente em condições operacionais inflamáveis, o hidrocarboneto compreende propileno, as reações em fase gasosa compreendem oxidação do propileno. Nesta modalidade, os materiais de atenuação podem, por exemplo, compreender cilindros de malha de arame ondulado e poliedros de malha de arame ondulado. Em uma outra modalidade, os materiais gasosos
10 adicionalmente compreender amônia, o hidrocarboneto compreende metano e as reações em fase gasosa compreendem amoxidação do metano. Os materiais de atenuação usados no reator para amoxidação de metano podem adequadamente compreender poliedros de espuma cerâmica.

15 EXEMPLOS

Exemplo 1

Um vaso de pressão de volume de 141 pés³ (4 m³), equipado com uma fonte de ignição e vários sensores e dispositivos para medir a temperatura e pressão, foi usado para testar a pressão de deflagração máxima alcançada por gás combustível inflamado no vaso de pressão, tanto na ausência quanto na presença de diferentes materiais de atenuação.

Primeiramente, o vaso de pressão vazio foi carregado com gás combustível, tendo a composição de 4 % em volume de propileno, 11 % em volume de nitrogênio e 85 % em volume de ar, com base no volume total do gás combustível e inflamado e a pressão de deflagração máxima real alcançada foi medida.

Depois da evacuação, o vaso de pressão foi carregado com anéis de Pall de aço inoxidável de 2-polegadas (5,1 cm) de diâmetro, obtendo uma área superficial de 35 pés²/pés³ (1,15 cm²/cm³) e então novamente

carregado com o gás combustível mencionado anteriormente, que foi inflamado e medições de pressão foram feitas. O mesmo procedimento foi realizado com anéis de Pall de aço inoxidável de 1-polegada (2,54 cm), obtendo uma área superficial de 65 pés²/pés³ (2,13 cm²/cm³) e então com

5 anéis de Pall de aço inoxidável de 5/8-polegadas (1,6 cm), obtendo uma área superficial de 110 pés²/pés³ (3.61 cm³/cm³) e então com malha tecida de aço inoxidável ondulada (construída de 0,0105-polegada (0,2667 mm) de diâmetro de fio que foi ondulado e laminado para obter uma densidade de 288 quilogramas/metro cúbico (18 libras/pé cúbico) e é comercialmente

10 disponível da Koch-Otto York Separations Technology of Wichita, KS) que foram colocados na região definida camada sobre camada até que a região definida fosse carregada, obtendo uma área superficial de 97 pés²/pés³ (3,18 cm²/cm³). A pressão de deflagração máxima obtida usando cada um dos materiais de atenuação mencionados anteriormente, comparada à área

15 superficial total e às pressões máximas obtidas nos outros testes são fornecidos a seguir na tabela 1.

Tabela 1

Tipo de recheio	Volume recheado no vaso (pé ³)(=0,03 m ³)	Área superficial total (pé ²)(=0,09 m ²)	Temp inicial (°C)	Pressão inicial (psig)(= 6,9 kPa man.)	P(max) real (psig)(= 6,9 kPa man.)
nenhum			44	23	290
anéis Pall de 2-in (5,08 cm)	120	4.200	25	23	400
anéis Pall de 1-in (2,54 cm)	110	7.150	53	25	45
anéis Pall de 5/8-in (1,59 cm)	110	12.100	157	25	58
anéis Pall de 5/8-in (1,59 cm)	110	12.100	148	25	65
Malha de arame ondulado	140	13.580	158	25	44
Malha de arame ondulado	140	13.580	156	25	44

A partir dos dados da tabela 1, ficará óbvio que nenhum dos materiais testados preveniu com êxito a combustão em virtude de, se a

20 combustão tivesse sido prevenida com êxito, não haver nenhum aumento de pressão apreciável no vaso de teste (isto é, pressão inicial = P_{max}) depois da ignição. Adicionalmente, dado que todos os materiais de atenuação que foram testados foram do mesmo material de construção (aço inoxidável) e, desta

forma, tiveram a mesma condutividade térmica, seria esperado com base nos preceitos da técnica de projeto de contenção de chama que, se a remoção de calor foi de fato o mecanismo de controle neste sistema de teste, deve haver uma correlação muito forte entre a área superficial total e $P_{\max}$. Entretanto, é evidente a partir dos dados da tabela 1 que não existe correlação consistente entre área superficial total e $P_{\max}$. Tanto anéis de Pall de uma polegada, com uma área superficial total de 7.150 pés² (664,25 m²) quanto malha de arame ondulado, com uma área superficial total de 13.580 pés² (1.261,62 m²), alcançaram um valor $P_{\max}$ menor que anéis de Pall de 518 polegadas (13,15 m), com uma área superficial intermediária total de 12.100 pés² (1.124,13 m²). Adicionalmente, anéis de Pall de 2 polegadas (0,05 m), com uma área superficial total de 4.200 pés² (390,19 m²), alcançaram um valor $P_{\max}$ que significativamente excedeu o do vaso vazio (nenhuma área superficial). Apesar dos preceitos da técnica anterior, estes resultados de teste surpreendentes sugerem que algum outro mecanismo, até agora não identificado está funcionando em sistemas de gás combustível.

Exemplo 2

Figuras 6 e 7A-7D foram fornecidas para facilitar o entendimento do seguinte exemplo do método e um reator tubular, de acordo com a presente invenção.

De maneira a se obter fabricação de ácido acrílico em maiores taxas de produção, uma escala comercial, reator de casco e tubo (tubular) de oxidação de propileno de alta produtividade (não mostrado *per se*) foi configurado para operação segura com um gás de alimentação de alto teor de hidrocarboneto inflamável compreendendo mais que 7 % de propileno a uma pressão de 2,55 bar (37 psia) e uma temperatura de 207 °C (405 °F). Tal operação de alta produtividade foi, até agora, inatingível, conforme o amplo conhecimento da técnica anterior (ver, por exemplo, patentes U.S. Nos. US 7.074.955, US 7.102.030 e US 7.326.810, bem como pedidos de patente U.S.

Nos. US2006/0111575 e US2006/0166365), preceitua que operação nas condições de composição de alimentação inflamáveis ou mesmo próximo de inflamáveis deve ser evitada. Depois da implementação do método e aparelho da presente invenção, entretanto, este valioso modo de operação pode agora ser utilizado para a segurança da operação de processos de oxidação de alta produtividade, tal como, por exemplo, a fabricação de acroleína e ácido acrílico.

O reator de casco e de tubo deste exemplo compreendia mais de 25.000 de tubos soldados a uma chapa do tubo de entrada de diâmetro horizontal de 6.750 milímetros (22 pés) (não mostrado *per se*, mas refere-se, no geral, à figura 1 e à descrição em anexo). O reator de casco e de tubo foi configurado como um casco de reator simples, que significa que múltiplas zonas de reação, com diferentes composições de catalisador, foram presentes em um único vaso, cada tubo tendo múltiplas zonas e subzonas de reação para condições de reação ideais.

O volume de topo livre (isto é, a região de entrada definida) deste reator de casco e de tubo de fluxo ascendente (significando a região de entrada definida é localizada na “base” do reator, isto é, região definida 22 na figura 1) foi carregado com material de atenuação compreendendo componentes que atenuam a pressão que atenuam a pressão de deflagração, de acordo com o método da presente invenção. Para atingir este resultado, o material de atenuação compreendeu uma variedade de componentes de malha de arame que foram manualmente posicionados na cabeça do reator para minimizar caminhos de fluxo axial (por exemplo, para prevenir canalização). As figuras 6 e 7A-7D, no geral, ilustram a configuração resultante dos componentes de malha de arame para esta modalidade, que é descrita em mais detalhe daqui em diante.

O reator, de acordo com a modalidade inventiva deste exemplo, foi seguramente operado nas seguintes condições de alimentação:

Temperatura de entrada	207 °C
Pressão de entrada	22 psig (0,15 mPa)
% de Propileno	7,80
% de Propano	0,50
% de N ₂	65,43
% de O ₂	14,62
% de H ₂ O	10,40
% de CO ₂ + CO	0,50
% de Outros - inclui: ácido acético, fórmico, maleico & acrílico; acetaldeído; acetona; acroleína; formaldeído; e argônio	0,75

Com referência à figura 6, uma vista lateral em elevação do conjunto da cabeça da entrada do reator 30 é mostrada, conectada ao reator 32 (somente parcialmente mostrada) de maneira a formar um volume de topo livre fechado (região de entrada definida 34) com a chapa do tubo de entrada 36.

Um flange de tubulação de entrada 38 é posicionado na linha central 40 do conjunto da cabeça de entrada 30 para permitir que o gás de alimentação (não mostrado *per se*) entre no volume de topo livre (região de entrada definida 34). O conjunto da cabeça da entrada do reator 30 compreende uma cabeça toriesférica 42 fundida a uma seção de canal de parede reta, longa de 1.855 milímetros (6,1 pés) 44. As dimensões do volume de topo livre do reator são, desta forma, cerca de 6.750 milímetros (22 pés) de diâmetro e cerca de 3.125 milímetros (10,25 pés) de altura geral medido na linha central 40 do conjunto da cabeça de entrada 30. O volume de topo livre fechado 34 tem um volume de 96,1 metros cúbicos (3.393 pés cúbicos).

A malha de arame específica usada para preparar os componentes desta modalidade foi uma malha de arame tecida, compreendendo fio de aço inoxidável 304L de 0,0105 polegada de diâmetro (0,27 mm) – comumente referido como “malha de volume” – que foi ondulado e laminado para alcançar uma densidade de 288 quilogramas/metro cúbico (18 libras/pé cúbico) e obtido da ACS Industries of Hartford, CT. Malha de arame adequada também pode ser comercialmente obtida da Koch-Otto York Separations Technology of Wichita, KS ou Metex Corporation of

Edison, NJ. Tipicamente, tal malha de arame é construída como um tubo trançado e é então tanto achatada para uso em uma forma de "manta" de camada dupla ou dividida para uso em uma forma de chapa de uma única camada.

5 Na presente modalidade, uma combinação de componentes de malha de arame, compreendendo cilindros e almofadas retangulares, foi colocada no volume de topo livre fechado 34. Para formar componentes de malha de arame cilíndricos ("rolos"), seções retangulares de malha de arame de duas camadas foram primeiramente onduladas e então enroladas para
10 formar um cilindro de uma altura final e diâmetro especificados, com uma densidade aparente de cerca de 288 quilogramas/metro cúbico (18 libras/pé cúbico), com uma tolerância de +/- 0,5 libra/pé cúbico. Para formar componentes de malha de arame de almofada retangular ("mantas"), seções retangulares de malha de arame de duas camadas foram primeiramente
15 onduladas e então dispostas em camadas para formar uma almofada retangular de um comprimento, largura e altura final especificadas com uma densidade aparente de cerca de 288 quilogramas/metro cúbico (18 libras/pé cúbico).

Embora a ondulação seja opcional, o uso de ondulações
20 aumenta a fração vazia da malha de arame, fornecendo uma menor densidade aparente para um menor peso total instalado de componentes. Em uma modalidade alternativa, malha de arame de duas camadas não onduladas pode ser usada para formar rolos de malha de arame e mantas de malha de arame com uma densidade aparente de cerca de 416 quilogramas/metro cúbico (26
25 libras/pé cúbico).

Para o volume de topo livre específico da presente modalidade, descrito anteriormente, os seguintes componentes de malha de arame listados na tabela 2 foram usados:

Tabela 2

Dimensões do componente especificado necessárias para esta modalidade ("OD" = diâmetro externo)	Número total de componentes necessários para implementar esta modalidade
Malha de arame cilíndrica enrolada	
• 18 polegadas (0,45 m) de OD x 14,5 polegadas (0,37 m) de altura	710 rolos
• 18 polegadas (0,45 m) de OD x 13 polegadas (0,33 m) de altura	300 rolos
• 12 polegadas (0,30 m) de OD x 14,6 polegadas (0,37 m) de altura	452 rolos
• 12 polegadas (0,30 m) de OD x 13 polegadas (0,33 m) de altura	192 rolos
• 12 polegadas (0,30 m) de OD x 10 polegadas (0,25 m) de altura	18 rolos
• 12 polegadas (0,30 m) de OD x 8 polegadas (0,20 m) de altura	87 rolos
• 12 polegadas (0,30 m) de OD x 6 polegadas (0,15 m) de altura	69 rolos
• 12 polegadas (0,30 m) de OD x 4 polegadas de altura	88 rolos
• 2,6 polegadas (0,6 m) de OD x 14,6 polegadas (0,37 m) de altura	1.722 rolos
• 2,6 polegadas (0,6 m) de OD x 13 polegadas (0,33 m) de altura	794 rolos
Malha de arame de almofada retangular disposta em camadas	
• 14,6 polegadas (0,37 m) x 12 polegadas (0,30 m) x 3 polegadas (0,07 m)	355 mantas
• 12 polegadas (0,30 m) x 12 polegadas (0,30 m) x 6 polegadas (0,15 m)	495 mantas
• 73 polegadas (1,85 m) x 24 polegadas (0,61 m) x 3 polegadas (0,07 m)	40 mantas

Os componentes de malha de arame listados anteriormente foram manualmente colocados na região de entrada definida 34 de acordo com os desenhos mostrados nas figuras 7A-7D para cada nível de elevação marcado. Isto resultou em um volume de topo livre fechado (região de entrada definida 34) que foi essencialmente preenchido completamente com material de atenuação compreendendo rolos e mantas de malha de arame onde a superfície mais superior da malha de arame foi posicionada a uma distância entre cerca de 0 a 15 centímetros da chapa do tubo de entrada 36.

Os cinco níveis na área de entrada definida 34 mais próximos à

película do tubo, isto é, níveis R-R, S-S, T-T, U-U e V-V (ver figura 6), respectivamente, foram recheados similarmente, da forma mostrada na figura 7A, uma vez que eles tinham a mesma geometria, particularmente, o mesmo diâmetro. Com referência novamente à figura 7A, rolos de malha de arame 50 que tinham 18 polegadas (0,45 m) de diâmetro e 14,6 polegadas (0,37 m) de altura foram usados para preencher a maioria do volume de topo livre nestes níveis, enquanto que rolos de malha de arame 52 de 12 polegadas (0,30 m) de diâmetro e 14,6 polegadas (0,37 m) de altura foram posicionados em volta do perímetro da pluralidade dos maiores rolos de malha de arame 50. Também, rolos de malha de arame 54 tendo 2,6 polegadas (0,06 m) de diâmetro e tendo 14,6 polegadas (0,37 m) de altura foram posicionados nos espaços vazios entre os maiores rolos de malha de arame 50 para preencher pelo menos algum dos espaços vazios entre os maiores rolos de malha de arame 50. Em cada nível (R-R, S-S, T-T, U-U e V-V), os rolos de malha de arame de altura de 14,6 polegadas (0,37 m) foram empilhados, de extremidade a extremidade, um no topo do outro, em ziguezague para desfazer os canais vazios que poderiam ser formados.

Mantas de malha de arame 56 de 3 polegadas de espessura, 73 polegadas (1,8 m) de altura e 24 polegadas (0,61 m) de largura foram comprimidas em uma camada em volta do perímetro da região de entrada definida e cobriram a altura total dos níveis R-R, S-S, T-T, U-U e V-V. Mantas de malha de arame menores 58 de 3 polegadas (0,07 m) de espessura, 14,6 polegadas (0,37 m) de altura e 12 polegadas (0,30 m) de largura foram inseridos nos espaços vazios entre os maiores mantas de malha de arame 56 e os rolos de malha de arame de tamanho médio 52 em volta do perímetro.

A figura 7B mostra a configuração de rolos e mantas de malha de arame no nível X-X, que tem um diâmetro menor que os cinco níveis mencionados anteriormente representados pela figura 7A. Em particular, uma combinação de rolos e mantas de malha de arame foi novamente empregada

com os maiores rolos 60 neste nível X-X tendo 18 polegadas de diâmetro e 13 polegadas de altura e sendo colocados centralmente de maneira a ocupar a maioria da área transversal do nível. Menores rolos de malha de arame 62, tendo 12 polegadas (0,30 m) de diâmetro, mas a mesma altura de 13 polegadas (0,33 m), foram colocados em volta do perímetro dos maiores rolos de malha de arame 60. Rolos de malha de arame 64 adicionais tendo as mesmas 12 polegadas (0,30 m) de diâmetro, mas tendo ainda 8 polegadas de altura, para acomodar a parede afunilada do volume de topo livre 34 (região de entrada definida) nesta altura, foram colocados em volta do perímetro dos menores rolos de malha de arame 62. Finalmente, o volume mais externo do nível X-X, em volta do perímetro dos rolos de malha de arame de 8 polegadas de altura 64 foi preenchido com mantas de malha de arame 66. Da forma mostrada na figura 7B, onde obstáculos foram encontrados no volume de topo livre 34, tais colunas, placas defletoras, bicos, etc. (por exemplo, ver colunas 68a, 68b na figura 7B), os componentes de malha de arame (por exemplo, os maiores rolos de malha de arame 60) podem ser arrumados, isto é, porções cortadas, para acomodar tais obstáculos, da forma prontamente entendida pelos versados na técnica.

A figura 7C mostra a configuração de rolos e mantas de malha de arame no nível Y-Y, que tem um diâmetro ainda menor que o nível mencionado anteriormente X-X representado pela figura 7B. Novamente, os maiores rolos de malha de arame 70 medem 18 polegadas (0,45 m) de diâmetro e 13 polegadas (0,33 m) de altura e foram colocados centralmente na área transversal do nível Y-Y. Rolos de malha de arame 72 tendo 12 polegadas (0,30 m) de diâmetro e somente 6 polegadas (0,15 m) de altura foram colocados em volta do perímetro dos maiores rolos de malha de arame 70 e mesmo rolos de malha de arame menores 74, que também têm 12 polegadas (0,30 m) de diâmetro, mas somente 4 polegadas (0,10 m) de altura, foram colocados em volta do perímetro dos rolos de malha de arame de 6

polegadas de altura 72. Mantas de malha de arame 76 foram usados para preencher o espaço remanescente entre os rolos de malha de arame de 4 polegadas de altura 74 e a parede do vaso W. Da forma vista na figura 8C, as colunas 68a e 68b se estendem para baixo do nível X-X e no nível Y-Y, de maneira tal que pelo menos poucos rolos de malha de arame de 12 polegadas (0,30 m) de altura 72 fossem arrumados como no nível anterior.

A figura 7D mostra a configuração de rolos e mantas de malha de arame no nível Z-Z, que têm um diâmetro ainda menor que o nível mencionado anteriormente Y-Y representado pela figura 7C. Conforme mostrado, os rolos de malha de arame de diferentes alturas, mas todos com 12 polegadas (0,30 m) de diâmetros, foram usados para preencher o nível Z-Z. Mais particularmente, os menores rolos de malha de arame 80 usados no nível Z-Z tinham 11 de altura e os próximos menores rolos de malha de arame 82, que foram colocados em volta do perímetro dos maiores rolos 80, têm uma altura de 8 polegadas. Rolos de malha de arame 84 que tinham 6 polegadas de altura (ainda com 12 polegadas (0,30 m) de diâmetro) foram próximos ao perímetro dos rolos de malha de arame de 11 polegadas (0,28 m) de altura 82 e ainda rolos de malha de arame menores 86, tendo uma altura de somente 4 polegadas (0,10 m) foram colocados em volta do perímetro dos rolos de malha de arame de 6 polegadas (0,15 m) 84. Como em todos os outros níveis, mantas de malha de arame 88 foram colocados em volta do perímetro dos rolos de malha de arame mais externos 86 para preencher o espaço remanescente da parede do vaso W.

Colocando os maiores (isto é, mais altos) rolos de malha de arame nas porções mais centrais de cada nível, rodeados pelos menores rolos de malha de arame possibilitaram que o material de atenuação de malha de arame preencha tanto volume de topo livre 34 quanto possível, uma vez que a parede dos vasos afunila na porção mais inferior do volume de topo livre 34 (região de entrada definida).

Em modalidades alternativas, o diâmetro do arame de um ou mais componentes dos materiais de atenuação pode variar - por exemplo, um diâmetro de arame de 0,008 polegada (1,52 m), ou de 0,011 polegada (0,003 m) podem ser usados - e o tamanho da malha de arame da treliça para um ou mais componentes pode variar - por exemplo, malha de agulha 30, ou malha de agulha 90, podem ser usadas - sem desviar do espírito do método inventivo. Tais mudanças, em combinação com ondulação opcional, podem ser para otimizar variáveis, tais como custo, facilidade de manuseio, densidade aparente e durabilidade e estão na capacidade de um versado na técnica, dado o benefício da presente descrição.

Adicionalmente, materiais alternativos de construção podem ser usados para formar os arames no preparo da malha de arame. Em uma modalidade, por exemplo, a malha de arame pode compreender cobre para resistir formação de fuligem polimérica por componentes que podem estar presentes em gases reciclados. Em uma outra modalidade, a malha de arame pode compreender aço inoxidável magnético. Ainda em uma outra modalidade, a malha é formada de fibras cerâmicas entrelaçadas compreendendo um ou mais materiais selecionados de sílica, alumina e zircônia.

Observa-se que, embora o exemplo anterior seja fornecido com relação a uma configuração de casco de reator simples, versados na técnica perceberão que, onde o vaso de processo compreende múltiplos reatores de casco e de tubo dispostos em tandem, com ou sem trocadores de resfriamento intermediários, cada reator contendo uma composição catalisadora para facilitar uma ou mais reação químicas, com ou sem subzonas, o material de atenuação pode ser colocado em uma ou mais de: a região de saída definida de um reator de casco e de tubo a montante, os trocadores de calor intermediários opcionais e a entrada do reator de casco e de tubo a jusante subsequente. Tais modalidades são benéficas em virtude de

a composição de gás de saída do reator a montante poder compreender um ou mais compostos capazes de formar uma mistura de gás combustível em vasos de processo a jusante subsequentes. Tais configurações são especialmente preferidas nos casos onde adições de oxidante suplementar (por exemplo, ar ou outras misturas compreendendo oxigênio) são feitas em um ou mais pontos intermediários aos dois reatores em tandem.

Além disso, embora o exemplo anterior diga respeito a um vaso de processo usado para oxidação catalítica, o método e aparelho da presente invenção são igual e benéficamente aplicáveis aos vasos de processo configurados para realizar outros tipos de reações químicas, tal como, por exemplo, amoxidação de metano em um reator de cianeto de hidrogênio de Adrussow. Por exemplo, um vaso de reação que produz cianeto como este pode ter um volume de topo livre de forma cônica (“região de entrada definida”) que é pelo menos 50 % preenchida com espuma cerâmica reticulada. A atenuação da deflagração, de acordo com o método da presente invenção é particularmente benéfica quando reatores de cianeto de hidrogênio são operados em condições de alimentação inflamáveis; tais condições podem ocorrer, por exemplo, quando o reator é operado em pressão atmosférica maiores (por exemplo, pressões de 30 psig ou mais), ou quando o reator é operado com alimentações enriquecidas com oxigênio. Em virtude dos aumentos da pressão especialmente energética que podem ocorrer na combustão de alimentação de gás combustível nos reatores de cianeto de hidrogênio enriquecidos com oxigênio, especialmente prefere-se empregar o método da presente invenção a reatores de cianeto de hidrogênio em que a razão de oxigênio para nitrogênio no gás de alimentação, medido na região imediatamente a montante do catalisador é maior que cerca de 25:75, por exemplo, maior que cerca de 30:70, ou ainda maior que cerca de 50:50.

Exemplo 3

Deseja-se utilizar um vaso de processo existente no serviço de

gás combustível, de acordo com o método da presente invenção. O vaso de processo foi um reator de oxidação do tipo casco e tubo (isto é, tubular), similar ao reator da figura 1 e foi operado em uma configuração de fluxo descendente, com gás combustível que entra na cabeça superior do vaso em uma pressão de operação de 3,42 bar (35 psig – 0,24 mPa) e uma temperatura de operação de 225 °C. O reator de saída não foi equipado com dispositivos de alívio da pressão de emergência, tais como discos de ruptura e então devem ser capazes de conter o aumento da pressão de qualquer evento de deflagração. A cabeça de entrada do vaso tinha um diâmetro interno de 675 cm (22 pés) e espessura de parede suficiente para fornecer uma pressão de contenção permitida máxima, $P(c)$, de 12 bar (160 psig – 1,10 mPa) nestas condições operacionais. A composição de gás combustível na região definida da cabeça do reator de entrada foi 5,5 % em volume de propileno, 19,5 % de oxigênio, 73,3 % de nitrogênio e 1,7 % de água.

De acordo com o método da presente invenção, a pressão de deflagração na cabeça de entrada do reator pode ser atenuada pelo preenchimento completo da região definida da cabeça de entrada do reator com esferas de alumina ocas de 90 mm (comercialmente disponível da DeepSea Power & Light of San Diego, CA USA). Embora estas esferas sejam fabricadas de 99,9 % de alumina, elas têm uma densidade aparente menor que a da água, benéficamente minimizando o peso total do material de atenuação que o reator deve suportar.

O objetivo foi, desta forma, determinar se tais esferas de alumina ocas de 90 mm fornecerão atenuação da pressão suficiente quando colocadas na cabeça de entrada, de maneira tal que o vaso de saída possa ser seguramente operado nas condições pretendidas. Em virtude do tamanho físico das esferas de alumina ocas de 90 mm (diâmetro real = 9,14 cm (3,6 polegadas)), entretanto, elas não podem ser diretamente avaliadas no equipamento de teste de explosão de 10 litros disponível.

De acordo com o método da presente invenção, vários materiais de atenuação tendo componentes em pequena escala foram primeiramente avaliados no aparelho de teste em escala laboratorial para estimar sua capacidade de atenuação da pressão no sistema do exemplo. Para o caso deste exemplo específico, testes foram realizados com esferas cerâmicas sólidas de 6 mm, cilindros de cerâmica sólidos de 6 mm x 10 mm e espuma cerâmica de 20 ppi.

Para todas as determinações de $P_{\max}$ neste exemplo, um aparelho de teste de explosão adiabática de 10 litros, projetado de acordo com as necessidades da European Standards DIN EN 13673-1 e DIN EN 13673-2, Setembro 2003, foi usado. Em particular, o aparelho incluiu uma esfera de teste isolada de 10 litros com um raio interno de 13,4 cm (5,3 polegadas). A esfera foi ajustada com um transdutor de pressão de ação rápida (modelo HEM-375-TM, fabricado por Kulite Semiconductor Products of New Jersey, USA), bem como dois termopares e uma fonte de ignição elétrica.

Em todos, mas o teste de vaso vazio (Test A), uma gaiola de tela de arame cilíndrica de 9 cm de diâmetro por 9 cm de comprimento também foi colocada em volta da fonte de ignição dentro da esfera de teste; esta gaiola garantiu que espaço livre suficiente (cerca de 0,57 litros) fosse mantido em volta do acendedor, de maneira tal que a combustão auto-sustentável pudesse ser iniciada.

Uma composição de gás de teste que casa com a composição de gás combustível pretendida de 5,5 % em volume de propileno, 19,5 % de oxigênio, 73,3 % de nitrogênio e 1,7 % de água foi preparada misturando gases componentes puros em um vaso de pré-mistura aquecido. Esta composição de gás de teste foi usada para todas as determinações de $P_{\max}$ neste exemplo.

Teste A: Vaso vazio

O vaso de teste vazio (não contendo nenhum material de

atenuação) foi primeiramente evacuado (< 1 mbar de pressão). A mistura gasosa de teste pré-misturada foi então introduzida no vaso para alcançar uma pressão de gás interna de 3,4 bar (35 psig – 0,02 mPa) e uma temperatura inicial de 225 °C. De acordo com os requerimentos dos padrões europeus mencionados anteriormente, o gás foi então inflamado e as pressões e temperaturas monitoradas para obter uma medição de P_{max} para a deflagração resultante no vaso de teste vazio.

Teste B: Esferas cerâmicas sólidas

Aproximadamente 14 kg de esferas de suporte DENSTONE 57 de 6 mm (quarto de polegada) de diâmetro (comercialmente disponível da Norton Chemical Products Corp. of Akron, Ohio, USA) foram vertidas no mesmo vaso de teste e deixadas auto-agrupar (nenhum ajuste manual foi feito para a densidade de recheio). Isto representou 94 % de volume de preenchimento das esferas cerâmicas (9,43 litros de esferas + 0,57 litros de espaço na gaiola de tela de arame). Conforme no caso anterior, o vaso foi em seguida evacuado e então carregado com gás de teste para alcançar uma pressão de gás interna de 3,4 bar (35 psig – 0,02 mPa) e uma temperatura inicial de 225 °C. O gás foi então inflamados para obter uma medida de P_{max} da deflagração resultante no vaso de teste com esferas cerâmicas. O diâmetro efetivo, D_s , destas esferas cerâmicas é determinado 0,64 cm (1/4"). O fator de mistura de deflagração (DMF) para estas esferas cerâmicas é determinada pela fórmula: $DMF = D_s / R_{ts} \times 40$, em que R_{ts} , o raio da esfera do vaso de teste, é 13,4 cm. Assim, o DMF para estas esferas cerâmicas é calculado como 1,91.

Teste C: Cilindros de cerâmica sólidos

Aproximadamente 13 kg de pelotas DENSTONE 57 de 6 mm (1/4") de diâmetro, 10 mm (3/8") de comprimento (comercialmente disponível da Norton Chemical Products Corp. of Akron, Ohio, USA) foram vertidas no mesmo vaso de teste e deixadas auto-agrupar (nenhum ajuste manual foi feito

- na densidade de recheio). Isto representou 94 % de volume de preenchimento de pelotas em forma de cilindro de cerâmica (9,43 litros de cilindros + 0,57 litros de espaço na gaiola de tela de arame). Novamente, o vaso foi evacuado e então carregado com gás de teste para alcançar uma pressão de gás interna de 3,4 bar (35 psig – 0,24 mPa) e uma temperatura inicial de 225 °C. O gás foi então inflamado para obter uma medida de P_{max} do evento de deflagração resultante no vaso de teste com cilindros de cerâmica. O diâmetro efetivo, D_s , destes cilindros de cerâmica pode ser determinado matematicamente considerando uma projeção bidimensional do cilindro inscrito em uma esfera.
- 10 Mais particularmente, conforme visto na figura 10, o cilindro é representado por um retângulo de altura H_c e largura D_c (igual ao diâmetro do cilindro). É prontamente evidente a partir da figura que a diagonal do retângulo inscrito é equivalente ao diâmetro, D_s , do círculo circunscrito. Assim, com $H_c = 0,9525$ cm (318 polegadas) e $D_c = 0,635$ cm (114 polegadas), o diâmetro efetivo D_s pode facilmente ser determinado como 1,14 cm (7.116 polegadas) e o DMF para estes cilindros de cerâmica pode então ser calculado como 3,42.

Teste D: Espuma cerâmica de 20 ppi

- Discos de 5 cm (2 polegadas) de espessura x 15 cm de diâmetro (6 polegadas) de 20 poros por polegada (20 ppi) de espuma cerâmica de alumina ALUCEL-LT (comercialmente disponível da Vesuvius Hi-Tech Ceramics of Alfred, New York, USA) foram manualmente colocados em uma pilha de múltiplas camadas no mesmo vaso de teste. Alguns dos discos de espuma foram quebrados em dez pedaços de fragmentos e estes fragmentos foram então ajustados no vaso de teste adjacente aos discos inteiros de maneira a minimizar espaço vazio na esfera de teste. Este procedimento resultou em aproximadamente 94 % de volume de preenchimento de espuma cerâmica (9,43 litros de partes de espuma + 0,57 litros de espaço na gaiola de tela de arame). A quantidade total resultante de espuma cerâmica no vaso de teste pesou aproximadamente 4 kg. Como antes, o vaso foi evacuado e então

carregado com gás de teste para alcançar uma pressão de gás interna de 3,4 bar (35 psig) e uma temperatura inicial de 225 °C. O gás foi então inflamado para obter uma medida de $P_{\max}$ do evento de deflagração resultante no vaso de teste com espuma cerâmica. O diâmetro efetivo, D_s , da espuma cerâmica pode ser determinado facilmente simplesmente convertendo a medida de poros por polegada (ppi) a centímetros. Assim, D_s para esta espuma cerâmica é 0,127 cm (= 1/20 polegada); o DMF para esta espuma cerâmica pode então ser calculado como 0,38.

Os resultados destes testes estão resumidos na tabela 3 a seguir:

Tabela 3

	Componente	Forma/Geometria	D_s , (cm)	DMF	$P_{\max}$	
					(bar)	(psig) (=6,9kPa man.)
A	Vaso vazio	---	---	0,00	19,2	263,3
B	Esfera cerâmica	6 mm de diâmetro	0,64	1,90	7,8	98,0
C	Cilindro cerâmico	10 mm de comprimento x 6 mm de diâmetro	1,14	3,42	9,6	124,0
D	Espuma cerâmica	20 ppi	0,127	0,38	6,8	83,9

A partir destes resultados, ficará evidente para um versado na técnica com o benefício desta descrição que todos os três dos componentes testados forneceria suficiente atenuação da pressão no sistema do exemplo para permitir operação segura. Entretanto, deseja-se saber se as esferas de alumina ocas de 90 mm podem ser usadas com este propósito. Desta forma, para responder a questão exposta neste exemplo, a relação matemática entre $P_{\max}$ e DMF é determinada como: $P_{\max}(n) = 0,064 \times \text{DMF}(n) + 6,194$. Um versado na técnica matemática reconhecerá que esta é uma relação linear entre $P_{\max}$ e DMF.

Esta relação é mostrada como uma linha de inclinação diagonal na figura 10. Os dados de DMF em função de $P_{\max}$ para os testes B, C e D, também são mostrados na figura 10. Para conveniência, $P_{\max}$ para o vaso vazio também está indicado na figura 10 por uma linha horizontal em

19,2 bar (1,92 mPa). Embora não estritamente requerido, a checagem visual fornecida pelo gráfico dos dados e linhas de tendência é recomendada, uma vez que fornece garantia adicional de que não existem sérios erro ou desvios do comportamento ideal no conjunto de dados.

5 A partir da figura 10, ficará imediatamente evidente que, com relação ao sistema de teste específico deste exemplo, qualquer material de atenuação selecionado para uso de acordo com o método da presente invenção deve ter um DMF menor que cerca de 14 polegadas, de maneira a fornecer qualquer atenuação mensurável de $P_{\max}$ no sistema do exemplo.

10 Adicionalmente, pode-se determinar (visualmente a partir da figura 10, ou matematicamente a partir da relação linear) que materiais de atenuação com um valor de DMF de cerca de 6 ou menos são requeridos de maneira a atenuar a pressão de deflagração ($P_{\max}$) a um nível igual ou menor que a pressão de contenção máxima ($P(c)$) do vaso do reator.

15 Finalmente, de acordo com o método da presente invenção, o DMF para as esferas de alumina ocas de 90 mm foi determinado em seguida. Neste caso, o cálculo de DMF foi com base na fórmula: $DMF = D_s / R_{pv} \times 40$, em que D_s foi o diâmetro das esferas ocas (= 9,14 cm) e R_{pv} foi o raio do vaso de processo (raio da cabeça de entrada do reator = 337,5 cm). A partir
20 disto, o DMF da esfera oca foi determinado como 1,08 e concluiu-se que o preenchimento completo da região definida da cabeça de entrada do reator com esferas de alumina ocas de 90 mm forneceria suficiente atenuação da pressão para seguramente operar o reator nas condições pretendidas.

Exemplo comparativo 1

25 O exemplo anterior ilustrou o benefício de preencher completamente um vaso de processo com componentes que atenuam a pressão (a condição de “100 % de volume de preenchimento”). Em algumas situações, entretanto, pode-se desejar, em vez de utilizar o conceito inventivo da presente invenção com menos que 100 % de volume de preenchimento em

um vaso de processo, por exemplo, minimizar o custo de compra de material de atenuação ou minimizar o tempo de instalação.

O aparelho de teste de explosão adiabática de 10 litros previamente descrito foi novamente utilizado para todas as determinações de $P_{\max}$ neste exemplo. Da forma previamente descrita, uma gaiola de tela de arame cilíndrica foi colocada em volta da fonte de ignição dentro da esfera de teste.

Nestes experimentos, entretanto, o volume interno da gaiola de tela de arame cilíndrica variou como um meio de ajustar o volume de pressão material de atenuação no vaso de teste. Três tamanhos de gaiola de tela de arame foram usados: 0,28 litro, 0,57 litro e 2,4 litros.

Novamente, a composição de gás de teste de 5,5 % em volume de propileno, 19,5 % de oxigênio, 73,3 % de nitrogênio e 1,7 % de água foi preparada misturando gases componentes puros em um vaso de pré-mistura aquecido. Esta composição de gás de teste foi usada para todas as determinações de $P_{\max}$ neste exemplo.

Teste E:

O acendedor de vaso de teste foi equipado com uma gaiola de tela de arame de 2,4 litros. Aproximadamente 10,7 kg de esferas de suporte DENSTONE 57 de 6 mm ($1/4''$) de diâmetro (comercialmente disponível da Norton Chemical Products Corp. of Akron, Ohio, USA) foram vertidas no vaso de teste e deixadas auto-agrupar (nenhum ajuste manual foi feito na densidade de recheio). Isto representou 76 % de volume de preenchimento de esferas cerâmicas (7,6 litros de esferas + 2,4 litros de espaço na gaiola de tela de arame). Conforme no caso anterior, o vaso foi em seguida evacuado e então carregado com gás de teste para alcançar uma pressão de gás interna de 3,4 bar (35 psig) e uma temperatura inicial de 225 °C. O gás foi então inflamado para obter uma medida de $P_{\max}$ do evento de deflagração resultante no vaso de teste com esferas cerâmicas.

Teste F:

O acendedor de vaso de teste foi equipado com uma gaiola de tela de arame de 0,57 litro (9 cm de diâmetro por 9 cm de comprimento). Aproximadamente 13,4 kg de esferas de suporte DENSTONE 57 de 6 mm de diâmetro (1/4 de polegada) (comercialmente disponível da Norton Chemical Products Corp. of Akron, Ohio, USA) foram vertidas no mesmo vaso de teste e deixadas auto-agrupar (nenhum ajuste manual foi feito na densidade de recheio). Isto representou 94 % de volume de preenchimento de esferas cerâmicas (9,43 litros de esferas + 0,57 litros de espaço na gaiola de tela de arame). Conforme no caso anterior, o vaso foi em seguida evacuado e então carregado com gás de teste para alcançar uma pressão de gás interna de 3,4 bar (35 psig) e uma temperatura inicial de 225 °C. O gás foi então inflamado para obter uma medida de $P_{\max}$ do evento de deflagração resultante no vaso de teste com esferas cerâmicas.

Teste G:

O acendedor de vaso de teste foi equipado com uma gaiola de tela de arame de 0,28 litro (9 cm de diâmetro por 4,5 cm de comprimento). Aproximadamente 14 kg de esferas de suporte DENSTONE 57 de 6 mm de diâmetro (1/4 de polegada) (comercialmente disponível da Norton Chemical Products Corp. of Akron, Ohio, USA) foram vertidas no mesmo vaso de teste e deixadas auto-agrupar (nenhum ajuste manual foi feito na densidade de recheio). Isto representou 97 % de volume de preenchimento de esferas cerâmicas (9,72 litros de esferas + 0,28 litros de espaço na gaiola de tela de arame). Conforme no caso anterior, o vaso foi em seguida evacuado e então carregado com gás de teste para alcançar uma pressão de gás interna de 3,4 bar (35 psig) e uma temperatura inicial de 225 °C. O gás foi então inflamado para obter uma medida de $P_{\max}$ do evento de deflagração resultante no vaso de teste com esferas cerâmicas.

Os resultados destes testes estão resumidos na tabela 4 a

seguir:

Tabela 4

	Componente	Volume vazio (litros)	% de preenchimento de volume	P _{max}	
				(bar)	(psig) (=6,9 kPa man.)
A	Vaso vazio	10	0%	19,2	263,3
E	esfera cerâmica de 6 mm	2,4	76%	10,5	138,0
F	esfera cerâmica de 6 mm	0,57	94%	7,8	98,0
G	esfera cerâmica de 6 mm	0,28	97%	7,0	86,1

Estes dados mostram que para materiais de atenuação com componentes tendo a mesma geometria e o mesmo diâmetro efetivo (Ds), maior atenuação da pressão pode ser alcançada com o aumento do volume de preenchimento. A relação matemática entre estes pontos de dados foi determinada como: $P_{\max}(n) = -0,1214 \times \%VF(n) + 19,2$, em que %VF representa a % de volume de preenchimento de materiais de atenuação usados. Um versado na técnica matemática reconhecerá que esta é uma relação linear entre $P_{\max}$ e %VF.

Usando esta relação, prevê-se que 50 % de volume de preenchimento de materiais de atenuação podem então reduzir $P_{\max}$ a cerca de 13,1 bar (175 psig), representando uma redução na pressão de deflagração de cerca de 30 % ($= 6,1/19,2$). Adicionalmente, prevê-se que 35 % do volume de preenchimento de materiais de atenuação podem reduzir $P_{\max}$ a cerca de 15 bar (200 psig), representando uma redução na pressão de deflagração de cerca de 20 % ($= 4,2/19,2$).

Adicionalmente, prevê-se que 20 % do volume de preenchimento de materiais de atenuação podem reduzir $P_{\max}$ a cerca de 16,8 bar (229 psig), representando uma redução na pressão de deflagração de somente cerca de 10 % ($= 2,4/19,2$).

Esta redução relativamente pequena em $P_{\max}$ em baixa % de volume de preenchimento e o potencial incerto na extrapolação da relação linear longe dos valores medidos reais sugere que mais que 20 % do volume de preenchimento de materiais de atenuação devem ser usados na

implementação do método inventivo. Por exemplo, pelo menos 35 % do volume de preenchimento de materiais de atenuação podem ser usados na implementação do método inventivo, ou mesmo pelo menos 50 % ou 75 % do volume de preenchimento de materiais de atenuação.

5 Exemplo 4

Anéis Pall são um exemplo comum de um material de atenuação tendo componentes com pelo menos uma passagem principal.

10 Pode-se ver a partir da tabela 1, fornecida com relação ao exemplo 1 anterior, que componentes com pelo menos uma passagem principal nem sempre se comportam da maneira esperada com relação à atenuação da pressão de deflagração. Este desvio do comportamento de material de atenuação ideal pode, em alguns exemplos, como no caso de anéis Pall de 2" no vaso de teste de 4 metros cúbicos (ver exemplo 1 anterior), resulta em $P_{\max}$ realmente se tornando maior que $P_{\max}$ para o vaso vazio.

15 Para ilustrar este desvio do comportamento do material de atenuação ideal, valores de DMF para testes de anel Pall apresentados anteriormente na tabela 1 foram calculados e estes dados de DMF em função de $P_{\max}$ foram então dispostos em gráfico, da forma mostrada na figura 11. Determinou-se que a relação matemática entre os pontos de dados neste exemplo é: $P_{\max}(n) = -4,2146 \times [\text{DMF}(n)]^2 + 27,905 \times \text{DMF}(n) - 16,939$.
 20 Um versado na técnica matemática reconhecerá que isto como uma relação polinomial, em vez de uma relação linear idealizada, entre $P_{\max}$ e DMF (ver curva polinomial mostrada na figura 11). Para conveniência, $P_{\max}$ para o vaso vazio também é indicado na figura 11 por uma linha horizontal a 21 bar (290
 25 psig).

Pode-se ver a partir da figura 11 que materiais de atenuação tendo componentes com pelo menos uma passagem principal nem sempre se comportam da forma esperada com relação à atenuação da pressão de deflagração. É adicionalmente evidente que este comportamento não ideal foi

mais pronunciado a medida em que DMF aumenta. Sem ficar preso à teoria, hipotetiza-se que, a medida em que o diâmetro interno efetivo da passagem principal aumenta, a propagação da onda de pressão através do componente é favorecida, que significa que a propagação axial da onda de pressão de deflagração é promovida à custa da deflexão radial, resultando na redução do grau de atenuação de $P_{\max}$. Da forma previamente observada, em alguns exemplos, tal como no caso de anéis Pall de 2 polegadas (Tabela 1 anterior), o resultado em rede pode ser que $P_{\max}$ realmente se torne maior que $P_{\max}$ para o vaso vazio.

Para fornecer um melhor entendimento do comportamento do material de atenuação não ideal (isto é, com componentes tendo pelo menos uma passagem principal), determinações adicionais de $P_{\max}$ foram feitas usando componentes com mais que uma passagem principal – especialmente, meio de transferência de calor PROWARE™ TY-PAK ® de 3/4 de polegada e meio de transferência de calor HexPak™ 90 (ambos comercialmente disponíveis da Saint-Gobain Norpro of Stow, Ohio, USA). O procedimento de teste previamente descrito e aparelho de teste de 10 litros foram novamente usados para estes experimentos. Todos estes experimentos foram realizados na pressão inicial de 3,4 bar (35 psig) e uma temperatura inicial de 225 °C. Em todos os experimentos, uma composição de gás combustível de 5,5 % em volume de propileno, 19,5 % de oxigênio, 73,3 % de nitrogênio e 11 % de água foi usada.

Pode-se ver a partir dos dados tanto da tabela 1 (ver exemplo 1, anterior) quanto tabela 5 (a seguir) que materiais de atenuação tendo componentes com pelo menos uma passagem principal podem ser usados para atenuar com êxito a pressão de deflagração, de acordo com o método da presente invenção.

Tabela 5

	Componente	Geometria externa	Número de passagens principais	$P_{\max}$	
				(bar)	(psig) (=6,9kPa man.)
A	Vaso vazio	- - -	- - -	19,2	203
K	Proware tm Ty-pae	Gravata-borboleta	2	13,3	178
L	Proware tm Ty-pae	Gravata-borboleta	2	12,1	161
M	Proware tm Ty-pak	Gravata-borboleta	2	13,2	177
N	HexPak tm 90	Hexagonal	91	16,4	223
O	HexPak tm 90	Hexagonal	91	17,5	239

5 Acredita-se que para materiais de atenuação tendo componentes com pelo menos uma passagem principal, em que o tamanho da(s) passagem(s) principal(s) em cada componente é pequeno, fornecendo assim capacidade mínima para fluxo axial, uma relação linear ideal entre os valores de DMF e $P_{\max}$ existe. Entretanto, será evidente para um versado na técnica, dado o benefício da presente descrição, que componentes com pelo menos uma passagem principal podem desviar do comportamento do material de atenuação ideal a medida em que o tamanho do componente (e, desta

10 forma, valor de DMF) e o tamanho da(s) passagem(s) principal(s) aumenta. Desta forma, recomenda-se que um maior grau de teste de laboratório seja realizado para avaliar materiais de atenuação tendo componentes com passagens principais de maneira a verificar onde o desvio potencial do comportamento linear ideal ocorre.

15 Exemplo 5

O aparelho de teste de explosão adiabático de 10 litros previamente descrito foi novamente utilizado para as determinações $P_{\max}$ neste exemplo, em que malhas de arame cilindros foram avaliadas para uso como material de atenuação. Neste exemplo, uma gaiola de tela de arame

20 cilíndrica de 0,673 litro foi colocada em volta da fonte de ignição dentro da esfera de teste.

Uma composição de gás de teste de 5,5 % em volume de propileno, 19,5 % de oxigênio, 73,3 % de nitrogênio e 17 % de água foi preparada misturando gases componentes puros em um vaso de pré-mistura

aquecido. Esta composição de gás de teste foi usada para todas as determinações de $P_{\max}$ neste exemplo.

Testes H, I, J

Cilindros de malha de arame ondulado foram preparados a partir de películas retangulares de malha de arame de aço inoxidável 304L de 18 libras/pé cúbico ondulada. As películas foram laminadas em cilindros medindo cerca de 7,6 cm (3 polegadas) de diâmetro e cerca de 15,2 cm (6 polegadas) de comprimento. Alguns destes cilindros foram usados sem modificações, enquanto que alguns foram cortados para encurtar o comprimento de maneira a melhor ajustar a curvatura do vaso de teste. Aproximadamente 2,4 kg de cilindros de malha de arame ondulado foram manualmente colocados no vaso de teste para fornecer uma carga intimamente recheada que minimiza vazios e canais. Isto representou 93 % do volume de preenchimento de cilindros de malha. Como nos experimentos anteriores, o vaso foi em seguida evacuado e então carregado com gás de teste para alcançar uma pressão de gás interna de 3,4 bar (35 psig) e uma temperatura inicial de 225 °C. O gás foi então inflamado para obter uma medida de $P_{\max}$ da pressão de deflagração resultante no vaso de teste com cilindros de malha de arame ondulado. Experimentos foram repetidos para estimar a variabilidade desta modalidade e resultados estão apresentados na seguinte tabela 6.

Tabela 6

	Componente	$P_{\max}$	
		(bar)	(psig) (=6,9 kPa man.)
A	Vaso vazio	19,2	263
H	Malha de arame ondulado Cilindro	7,54	95
I	Malha de arame ondulado Cilindro	7,36	92
J	Malha de arame ondulado Cilindro	7,56	95

Deve-se observar que, em virtude da malha de arame poder ser comprimida, é possível fornecer um ajuste fiel que não pode ser alcançado com componentes rígidos, tais como esferas cerâmicas ou espuma cerâmica. O valor de DMF foi desenvolvido para contribuir com os efeitos facilmente

reprodutíveis da geometria, tamanho e fração de recheio dos componentes rígidos, em vez dos componentes compressíveis. Consequentemente, não parece que o conceito de DMF pode ser confiavelmente aplicado para extrapolar para os componentes de malha de arame; se for escolhido o uso de

5 malhas de arame cilindro, recomenda-se que o teste direto seja realizado da forma descrita aqui para garantir apropriada implementação do conceito inventivo e, adicionalmente, que cuidado substancial seja tomado para fazer o recheio de tais componentes o mais reprodutível possível.

Adicionalmente, deve-se observar que a fixação e compressão

10 dos componentes de malha de arame podem afetar a uniformidade do recheio do componente no vaso de processo. Ficará óbvio para um versado na técnica que a fixação e compressão são mais prováveis de ocorrer em vasos em grande escala, comercial em função dos vasos de teste em escala de laboratório, em virtude da maior carga estática criada quando a altura dos

15 componentes de malha de arame empilhados se torna maior. O interesse em uma situação como esta é que a fixação e compressão poderiam alterar a uniformidade da densidade de recheio da malha de arame, reduzindo assim a efetividade da malha de arame na atenuação da pressão de deflagração. Embora as mantas de malha de arame possam ser usadas em um vaso de

20 processo de acordo com o método da presente invenção, tais mantas – especialmente quando usadas como o componente principal no vaso de processo - são suscetíveis à fixação e compressão. Desta forma, prefere-se que a malha de arame primeiramente seja laminada em cilindros antes de colocar no vaso de processo, de maneira a fornecer a maior resistência à

25 fixação e compressão. Assim, em uma modalidade da presente invenção, a malha de arame não ondulado pode ser usada para formar cilindros de malhas de arame ou malha de arame ondulado pode ser usada de maneira a minimizar o peso total dos materiais de atenuação no vaso de processo.

Deve-se entender que as modalidades da presente invenção

aqui descritas são meramente exemplares e que um versado na técnica pode fazer variações e modificações sem fugir do espírito e escopo da invenção. Todas tais variações e modificações se destinam a estar incluídas no escopo da presente invenção.

REIVINDICAÇÕES

1. Método para atenuar pressão de deflagração produzida por combustão de gás combustível em uma região definida de um vaso de processo, que tem uma máxima pressão de contenção permitida ($P(c)$), sob condições operacionais conhecidas compreendendo a composição de gás de alimentação, temperatura e pressão iniciais, em que uma pressão de pico é alcançada na região definida depois da ignição e em que a região definida tem um raio transversal ($R(v)$), selecionando e colocando o material de atenuação na região definida do vaso de processo, em que o material de atenuação selecionado mantém sua forma física em condições operacionais e tem uma pluralidade de componentes, todos os quais têm uma geometria e um diâmetro efetivo, caracterizado pelo fato de que compreende:

(A) determinar o diâmetro efetivo máximo dos componentes do material de atenuação que é adequado para uso na região definida do vaso de processo desenvolvendo dados empíricos compreendendo pares associados de pressões de deflagração de pico e fatores de mistura de deflagração, que demonstra uma relação linear entre uma pluralidade de materiais de atenuação, pelo menos um dos quais tem componentes com um diâmetro efetivo que difere do diâmetro efetivos dos componentes dos outros materiais de atenuação e as pressões de pico alcançadas depois da ignição de gás combustível tendo a mesma composição que a composição de gás de alimentação inicial da seguinte maneira:

(1) determinando empiricamente a pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(0)$) resultante da ignição do gás combustível na ausência de qualquer material de atenuação, usando uma esfera de teste tendo um raio ($R(ts)$);

(2) determinando empiricamente pelo menos uma primeira e uma segunda pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(1)$, $P_{\max}(2)$) resultante da ignição do gás combustível na presença de pelo menos um primeiro material

de atenuação selecionado tendo um primeiro diâmetro efetivo ($D_s(1)$) e um segundo material de atenuação selecionado tendo um segundo diâmetro efetivo ($D_s(2)$) diferente do primeiro diâmetro efetivo, usando a mesma esfera de teste usada na etapa (1):

- 5 (3) calculando os fatores de mistura de deflagração ($DMF(0)$, $DMF(1)$, $DMF(2)$, ... $DMF(n)$) para cada pressão de deflagração associada de pico empiricamente determinada nas etapas (1) e (2), usando a seguinte relação matemática:

$$DMF(n) = (D_s(n)/R(ts) \times 40$$

em que $n = 0, 1, 2 \dots n$ e $D_s(n)$ e $R(ts)$ são cada um medidos

10 em centímetros;

- (4) linearizando os dados empíricos compreendendo pares associados de pressões de deflagração de pico e fatores de mistura de deflagração ($[P_{\max}(0), DMF(0)]$; $[P_{\max}(1), DMF(1)]$, $[P_{\max}(2), DMF(2)]$, ... $[P_{\max}(n), DMF(n)]$) determinando o valor de variáveis M e B com base na
- 15 seguinte relação matemática:

$$P_{\max}(n) = M \times DMF(n) + B$$

em que $n = 0, 1, 2 \dots n$;

- (5) calculando o fator de mistura de deflagração máximo ($DMF(a)$) adequado para o vaso de processo usando a máxima pressão de contenção permitida ($P(c)$) do vaso de processo e os valores de M e B
- 20 calculados na etapa (4), com base na seguinte relação matemática:

$$DMF(a) = [P(c) - B] / M;$$

- (6) calculando o diâmetro efetivo máximo ($D_s(a)$) do material de atenuação adequado para uso com o vaso de processo tendo o raio transversal ($R(v)$), usando a seguinte relação matemática:

$$D_s(A) = [DMF(A) \times R(v) / 40; e$$

- (B) selecionar o material de atenuação adequado tendo um
- 25 diâmetro efetivo menor ou igual ao diâmetro efetivo máximo calculado

(Ds(A)) e colocando o material de atenuação selecionado na região definida do vaso de processo, de maneira tal que espaços vazios e caminhos abertos entre os componentes sejam minimizados.

2. Método de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que a etapa (A)(1) da determinar empiricamente a pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(0)$) compreende:

(A) inflamação do gás combustível na esfera de teste, que está de outra forma vazia, na pressão e temperatura das condições operacionais pré-determinadas; e

(b) medição da maior pressão ($P_{\max}(0)$) alcançada na esfera de teste, depois da ignição;

e em que a etapa (A)(2) de determinar empiricamente pelo menos uma primeira e uma segunda pressão de deflagração de pico ($P_{\max}(1)$, $P_{\max}(2)$) compreende:

(a) inflamação de gás combustível na esfera de teste, depois de preenchê-la com o primeiro material de atenuação selecionado na pressão e temperatura das condições operacionais pré-determinadas;

(b) medição da maior pressão ($P_{\max}(1)$) alcançada na esfera de teste preenchida com o primeiro material de atenuação selecionado, depois da ignição;

(c) inflamação do gás combustível na esfera de teste, depois de preenchê-la com o segundo material de atenuação selecionado na pressão e temperatura das condições operacionais pré-determinadas; e

(d) medição da maior pressão ($P_{\max}(2)$) alcançada na esfera de teste preenchida com o segundo material de atenuação selecionado, depois da ignição.

3. Método de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que a etapa (A)(2) compreende determinar empiricamente uma pluralidade de pressões de deflagração de pico ($P_{\max}(1)$, $P_{\max}(2)$, $P_{\max}(3)$,

$P_{\max}(n)$) e utilizar cada uma da dita pluralidade de pressões de deflagração de pico nas etapas de cálculo e linearização (3), (4), (5) e (6).

4. Método de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o gás combustível compreende hidrocarbonetos e oxigênio.

5 5. Método de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o material de atenuação compreende pelo menos um tipo de material selecionado do grupo que consiste em: cerâmica, mineral, metal e polímero e a geometria do material de atenuação compreende pelo menos uma forma selecionada do grupo que consiste em: esférica, oval, cilíndrica,
10 arame, forma de sela, forma de bloco, alongada e poliédrica e pelo menos uma característica selecionada do grupo que consiste em: sólido, oco, poroso e tendo pelo menos uma passagem principal.

6. Método de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o vaso de processo é um reator de casco e de tubo que opera nas
15 condições de escoamento.

7. Método de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que quando o material de atenuação não é de auto-ordenação quando aleatoriamente fornecido à região definida do vaso de processo, colocando a etapa (B) compreende manualmente posicionar cada componente do material
20 de atenuação na região definida em que espaços vazios e caminhos abertos entre os componentes são minimizados.

8. Método de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o material de atenuação ocupa pelo menos 20 % em volume da região definida.

25 9. Reator tubular adaptado para atenuação da pressão de deflagração resultante da combustão de gás combustível no mesmo, caracterizado pelo fato de que o dito reator tubular compreende uma pluralidade de tubos cada um estendendo entre uma primeira e uma segunda placa perfurada, todas as quais são encerradas em um casco que forma uma

região de lado de casco para circulação de fluido em volta da pluralidade de tubos e uma região de lado de reação que compreende uma região de entrada definida, ligada em um lado pela primeira placa perfurada e tendo um raio igual ao raio da primeira placa perfurada e uma região de saída definida ligada em um lado pela segunda placa perfurada e tendo um raio igual ao raio da segunda placa perfurada, em que cada uma da pluralidade de tubos está em comunicação fluídica tanto com a região de entrada definida quanto de saída definida para passagem de fluidos de reação, o dito reator tubular adicionalmente compreendendo material de atenuação tendo uma pluralidade de componentes, todos os quais têm uma geometria e que são colocados de maneira tal que espaços vazios e caminhos abertos entre os componentes sejam minimizados, em que o material de atenuação ocupa pelo menos 20 % de pelo menos uma da região de entrada definida e a região de saída definida; em que os componentes do material de atenuação têm um diâmetro efetivo ($D_s(A)$) que satisfaz a seguinte relação matemática:

$$D_s(a) = [DMF(a) \times R(v)] / 40$$

em que $D_s(a)$ é em centímetros, ($DMF(a)$) é o fator de mistura de deflagração associado ao material de atenuação e que é determinado empiricamente pelo método, de acordo com a reivindicação 1 e $R(v)$ é o raio de qualquer região de entrada ou saída definida é ocupado pelo material de atenuação.

10. Reator tubular de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que o gás combustível compreende hidrocarbonetos e oxigênio e o reator opera nas condições de escoamento.

11. Reator tubular de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que o material de atenuação compreende pelo menos um tipo de material selecionado do grupo que consiste em: cerâmica, mineral, metal, polímero e a geometria do material de atenuação compreende pelo menos uma forma selecionada do grupo que consiste em: esférica, oval,

cilíndrica, forma de sela, forma de bloco, alongada e poliédrica e pelo menos uma característica selecionada do grupo que consiste em: sólido, oco, poroso e tendo pelo menos uma passagem principal.

5 12. Reator tubular de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que dois ou mais materiais de atenuação são colocados em pelo menos uma da região de entrada definida e região de saída definida e pelo menos um do material de atenuação tem componentes com uma geometria diferente da geometria dos componentes do outro material de atenuação.

10 13. Reator tubular de acordo com a reivindicação 9, caracterizado pelo fato de que dois ou mais materiais de atenuação são colocados em pelo menos uma da região de entrada definida e região de saída definida e pelo menos um do material de atenuação tem componentes com um diâmetro efetivo ($D_s(a)$) que satisfaz a seguinte relação matemática:

$$D_s(a) = [DMF(a) \times R(v)] / 40$$

15 em que $D_s(a)$ é em centímetros, ($DMF(a)$) é o fator de mistura de deflagração associado ao material de atenuação e que é determinado empiricamente pelo método, de acordo com a reivindicação 1 e $R(v)$ é o raio de qualquer região de entrada ou saída definida ocupada pelo material de atenuação.

20 14. Método para realizar reações em fase gasosa seguramente em condições operacionais inflamáveis, caracterizado pelo fato de que compreende uma composição de alimentação de gás, temperatura e pressão, o dito método compreendendo:

25 (A) fornecer um vaso de reação tendo uma região definida por meio da qual a dita composição de alimentação de gás passa, a dita região definida sendo pelo menos 20 % em volume ocupada por pelo menos um material de atenuação que mantém sua forma física nas condições operacionais inflamáveis;

(B) fornecer um ou mais materiais gasosos compreendendo um hidrocarboneto, um gás contendo oxigênio e, opcionalmente, um material inerte, ao dito vaso de reação para formar a dita composição de alimentação gasosa que passa através da dita região definida;

5 (C) submeter a dita composição de alimentação gasosa a uma ou mais reações no vaso de reação, a uma temperatura e pressão em que a dita composição de alimentação gasosa é inflamável.

10 15. Método de acordo com a reivindicação 14, caracterizado pelo fato de que o dito material de atenuação é selecionado, de acordo com o método da reivindicação 1.

15 16. Método de acordo com a reivindicação 14, caracterizado pelo fato de que o material de atenuação compreende pelo menos um tipo de material selecionado do grupo que consiste em: cerâmica, mineral, metal, polímero e cada um da pluralidade de componentes do material de atenuação tem uma geometria compreendendo pelo menos uma forma selecionada do grupo que consiste em: esférica, oval, cilíndrica, forma de sela, forma de bloco, alongada e poliédrica e pelo menos uma característica selecionada do grupo que consiste em: sólido, oco, poroso e tendo pelo menos uma passagem principal.

20 17. Método de acordo com a reivindicação 16, caracterizado pelo fato de que o dito hidrocarboneto compreende propileno, as ditas reações em fase gasosa compreendem oxidação do propileno, e os ditos materiais de atenuação compreendem cilindros de malha de arame ondulado e poliedros de malha de arame ondulado.

25 18. Método de acordo com a reivindicação 16, caracterizado pelo fato de que os ditos um ou mais materiais gasosos adicionalmente compreendem amônia, o dito hidrocarboneto compreende metano, as ditas reações em fase gasosa compreendem amoxidação do metano, os ditos materiais de atenuação compreendem poliedros de espuma cerâmica.

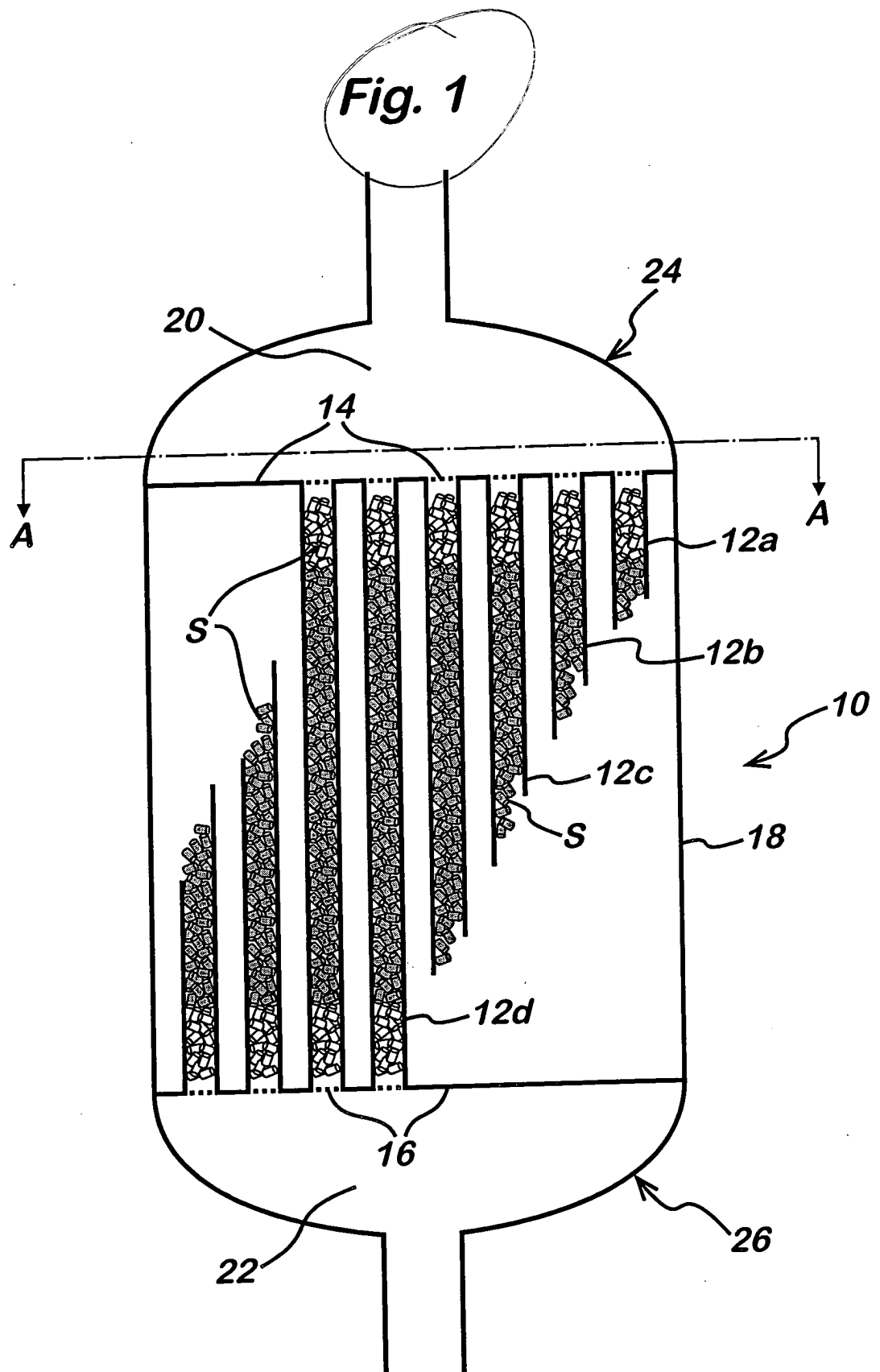


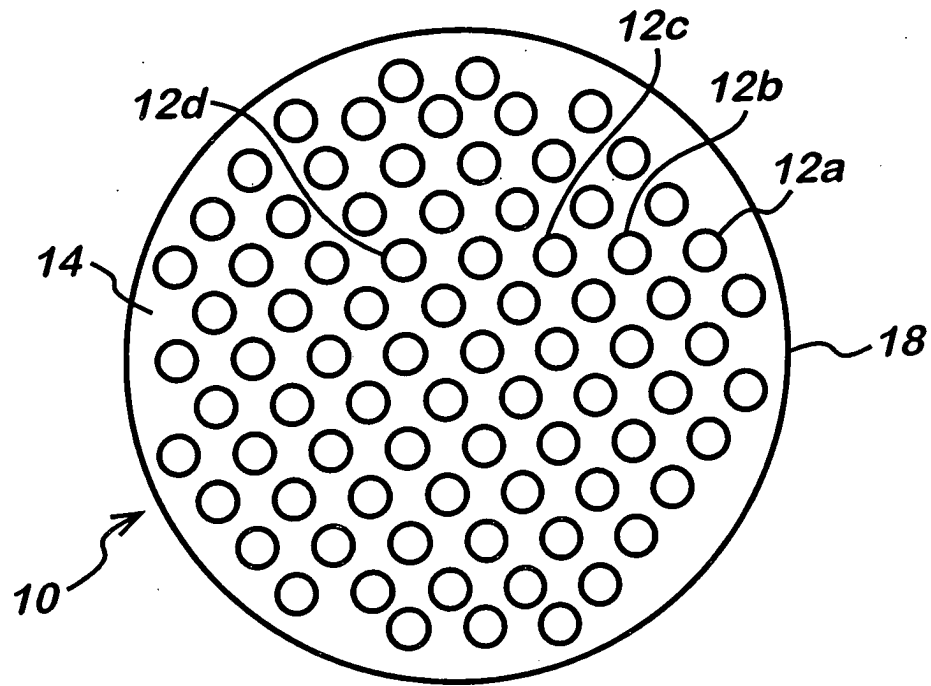
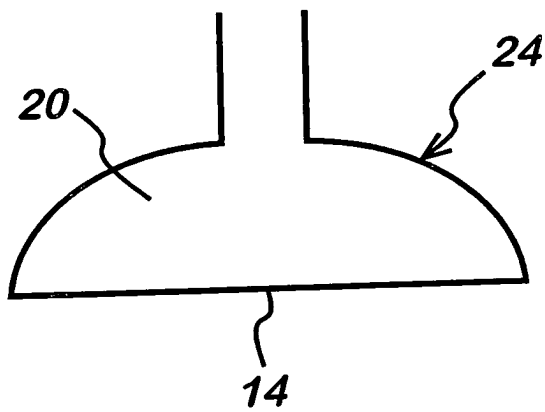
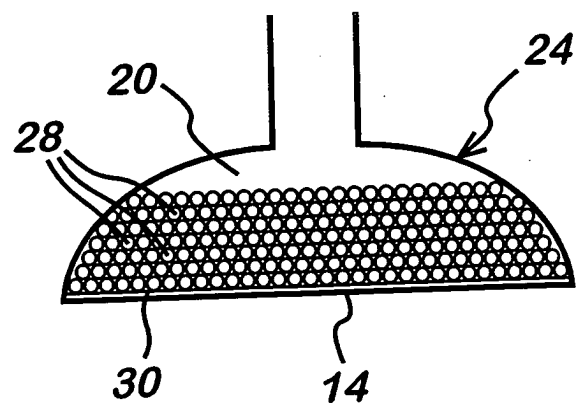
Fig. 2**Fig. 3A****Fig. 3B**

FIG. 4A

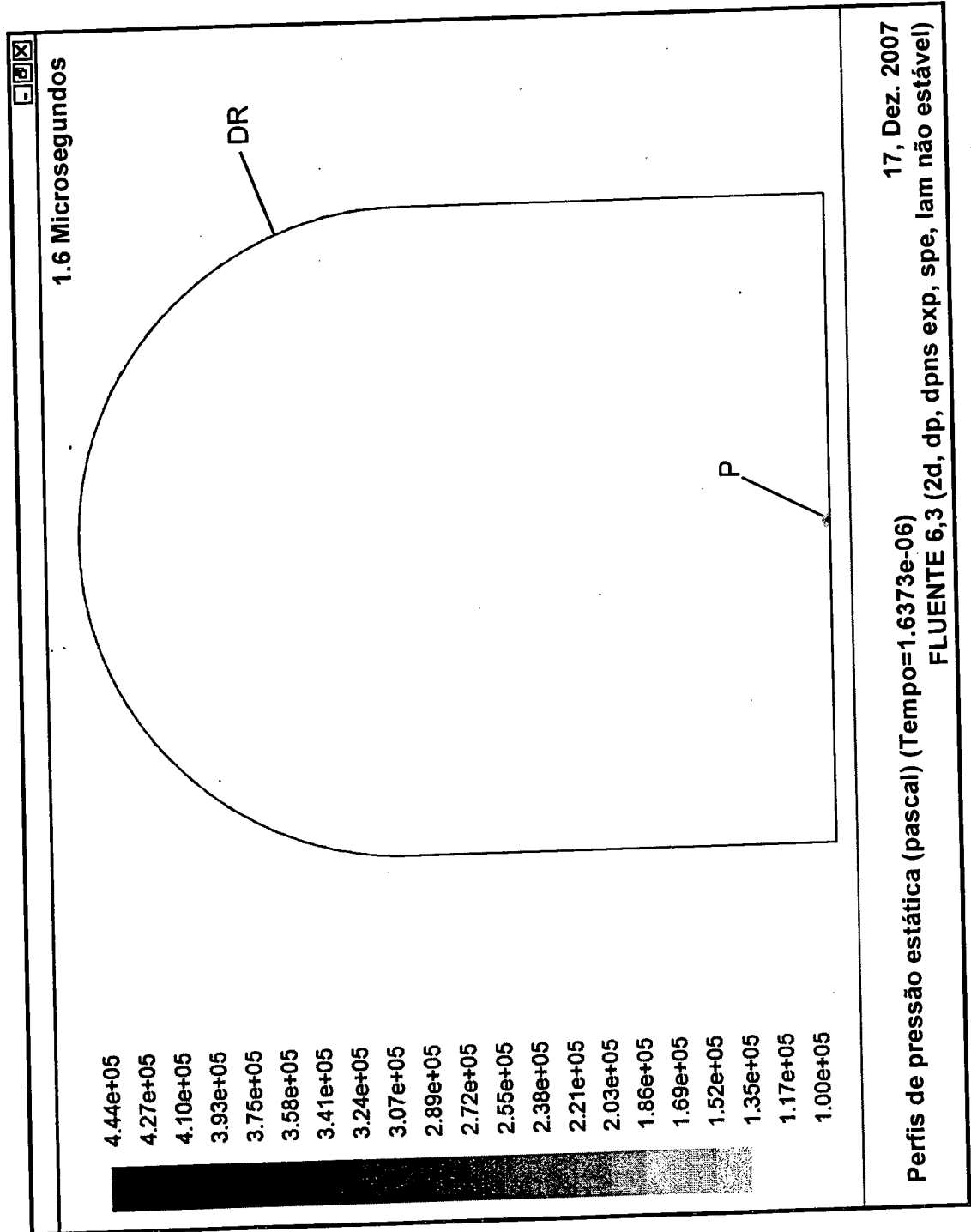
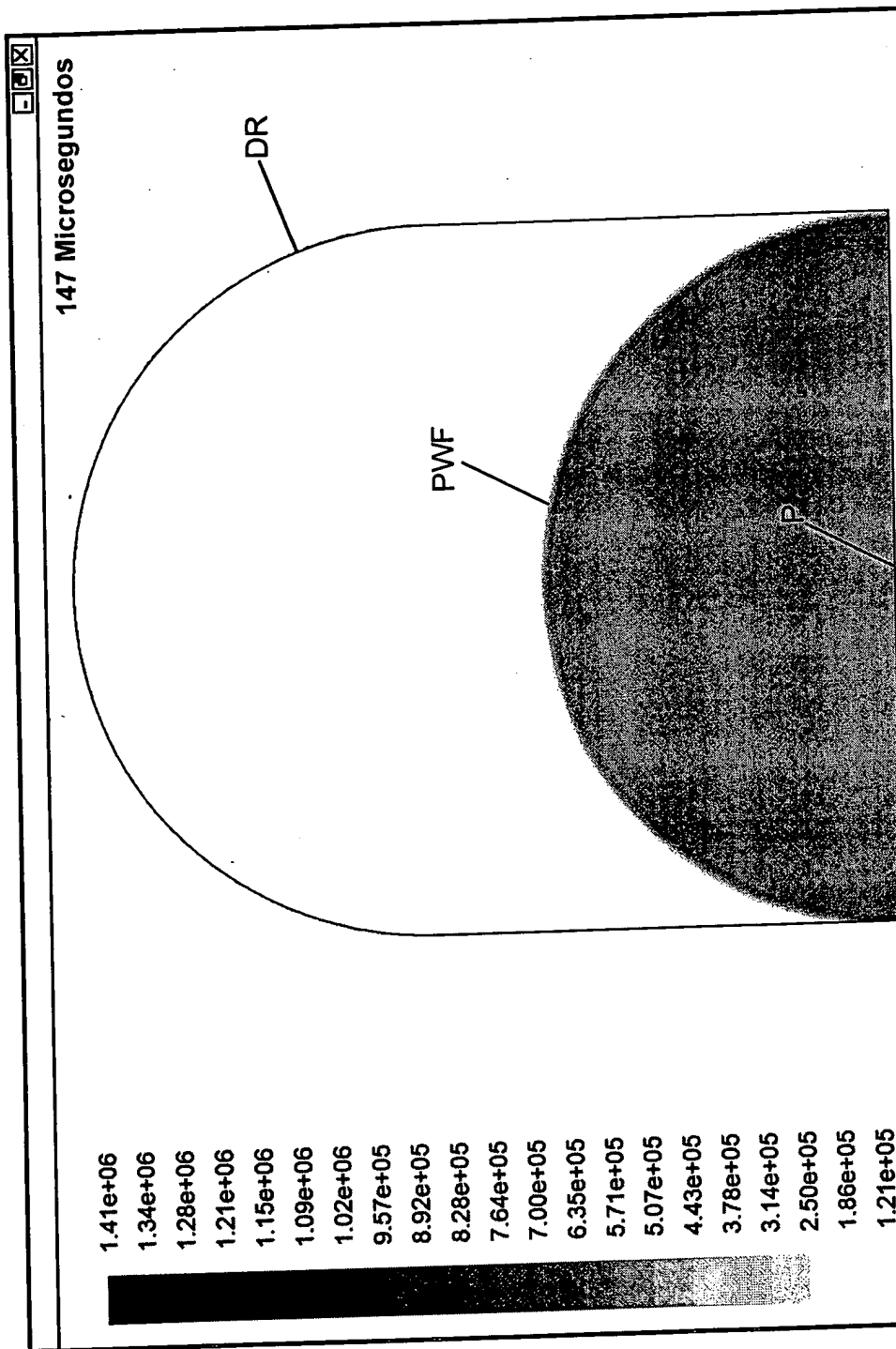


FIG. 4B



Perfis de pressão estática (pascal) (Tempo=1.4728e-04)

17, Dez. 2007
FLUENTE 6,3 (2d, dp, dpns exp, spe, lam não estável)

FIG. 4C

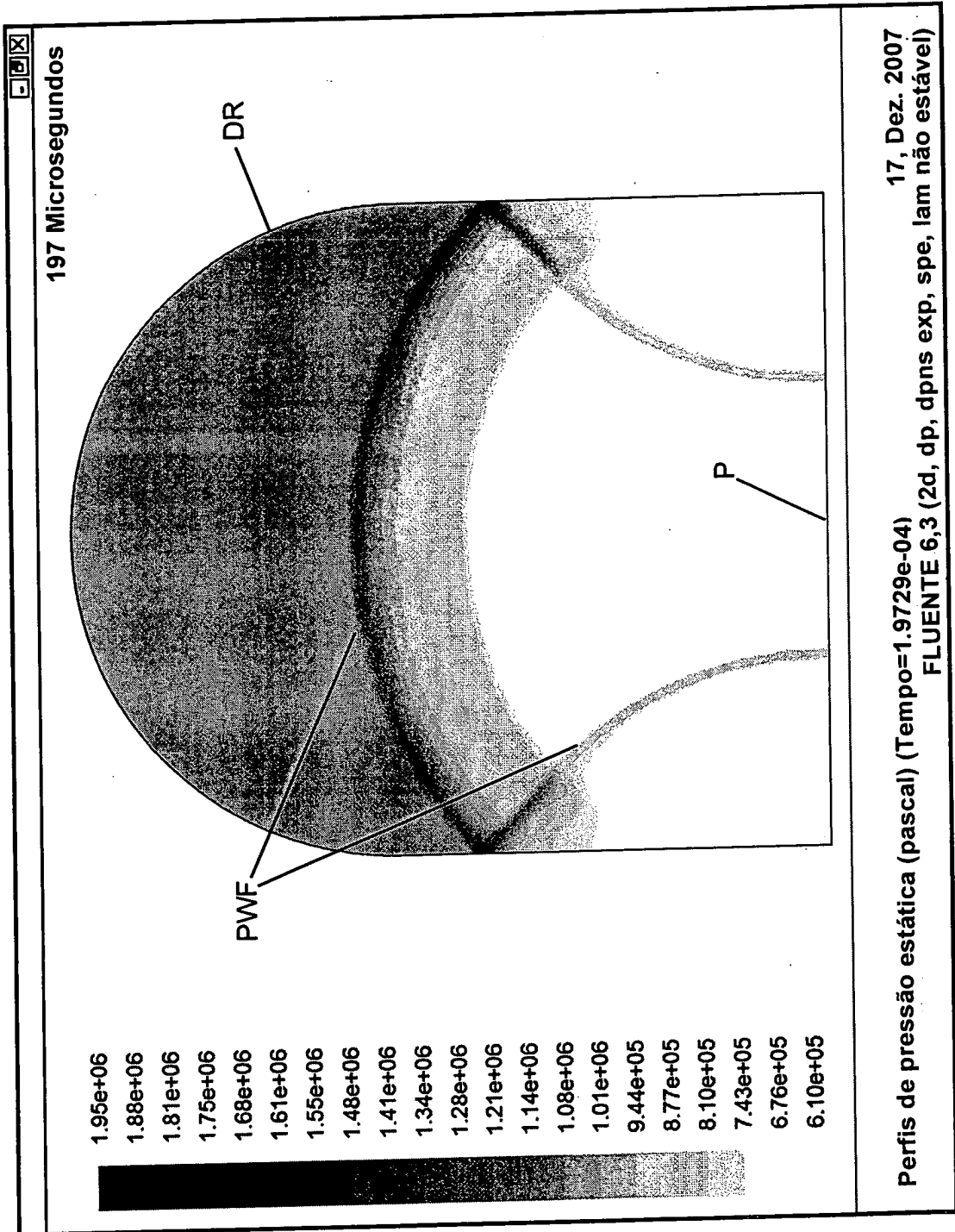
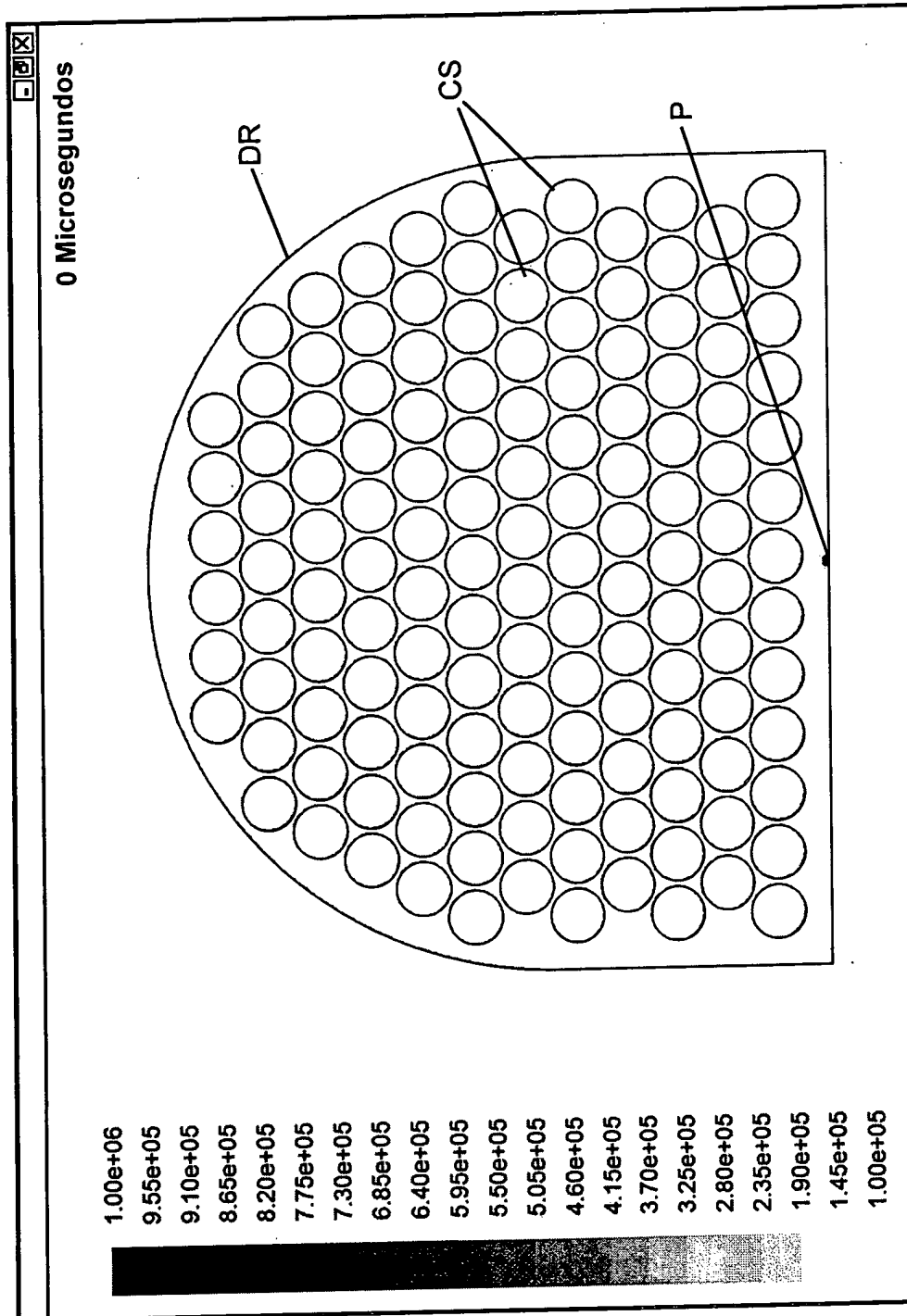


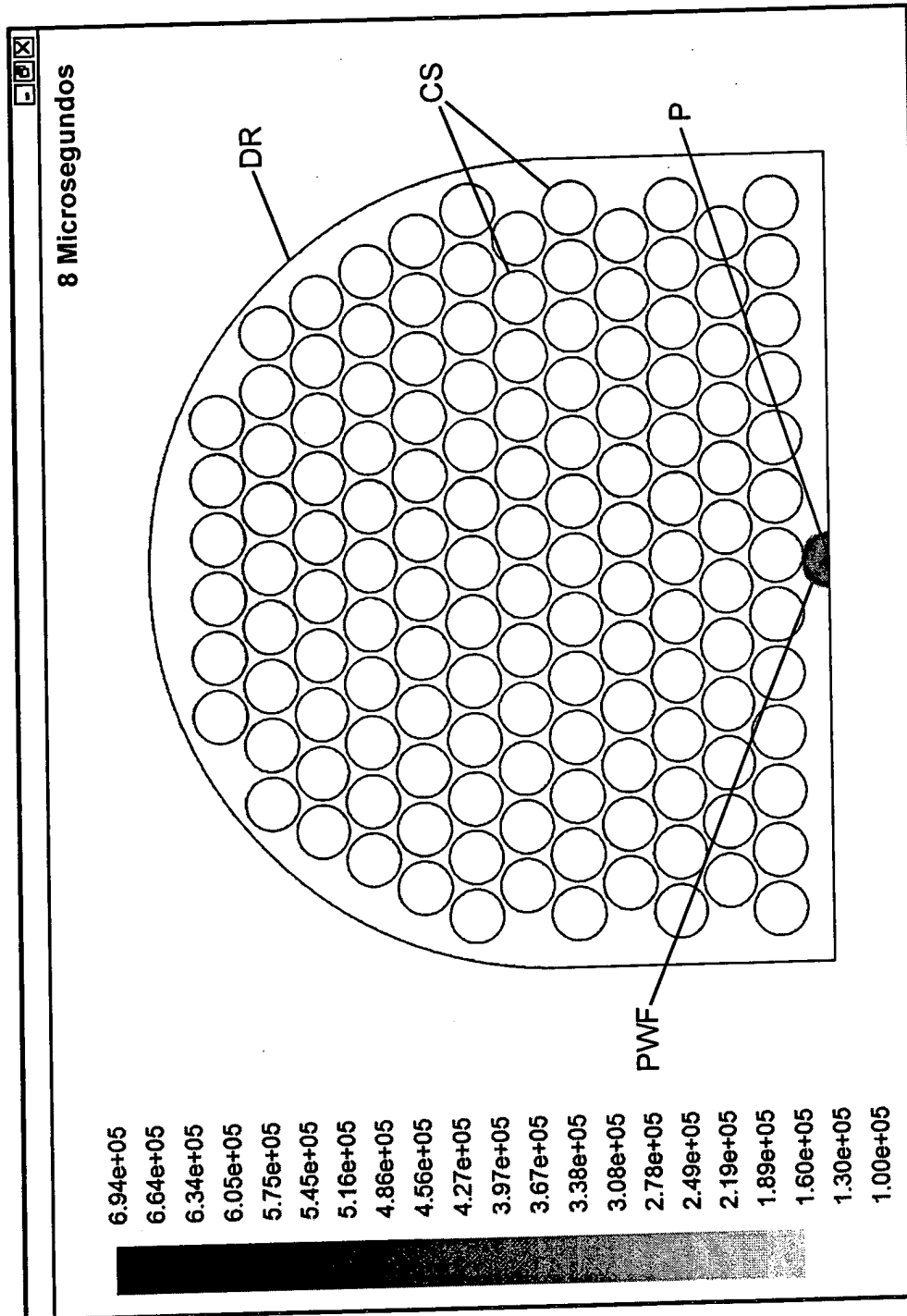
FIG. 5A



Perfis de pressão estática (pascal) (Tempo=0.0000e-00)
FLUENTE 6,3 (2d, dp, dpns exp, spe, lam não estável)

09, Dez. 2007

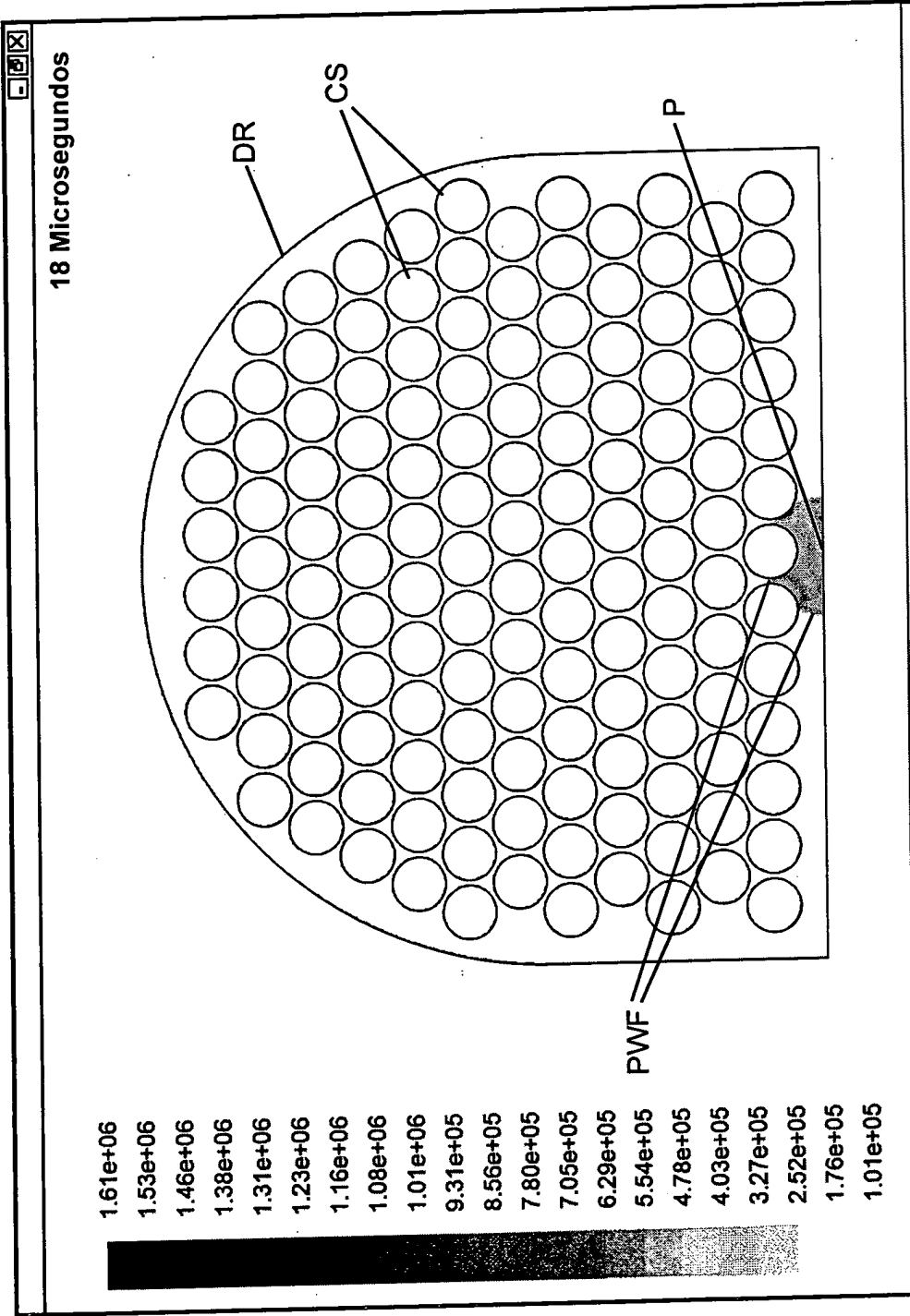
FIG. 5B



Perfis de pressão estática (pascal) (Tempo=1.1752e-06)
FLUENTE 6,3 (2d, dp, dpns exp, spe, lam não estável)

09, Dez. 2007

FIG. 5C



Perfis de pressão estática (pascal) (Tempo=1.8114e-05)
FLUENTE 6,3 (2d, dp, dpns exp, spe, lam não estável)

09, Dez. 2007

FIG. 5D

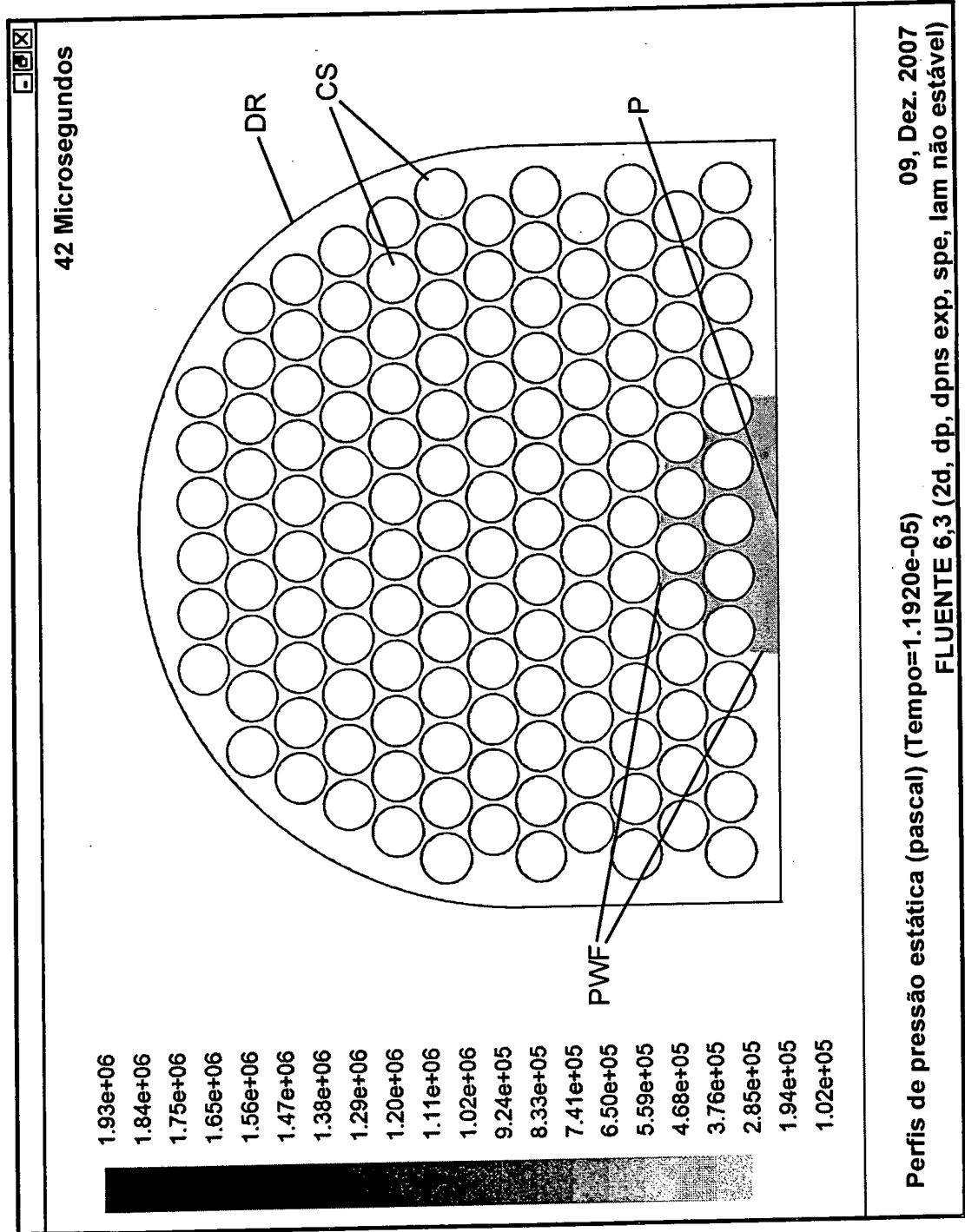


FIG. 5E

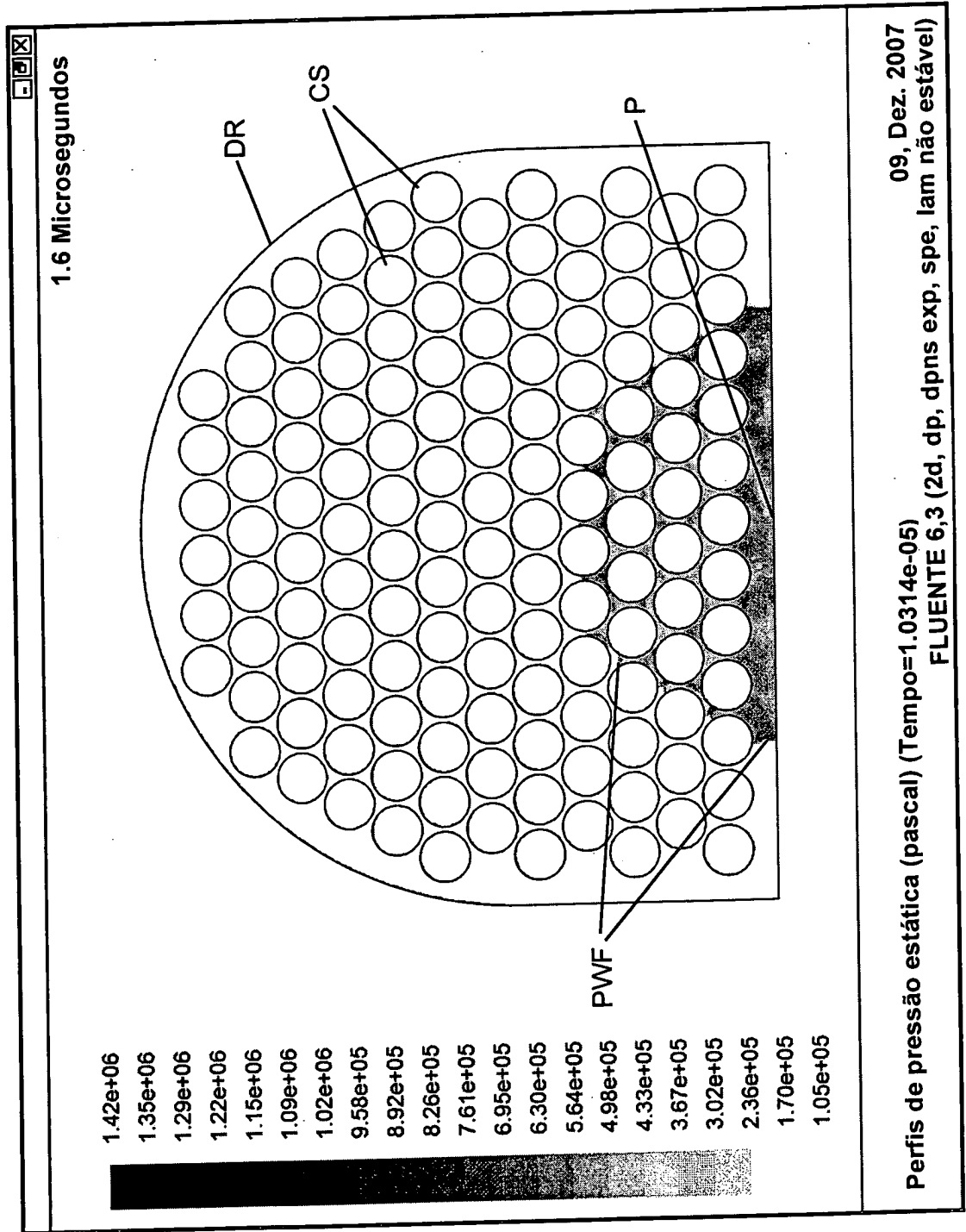
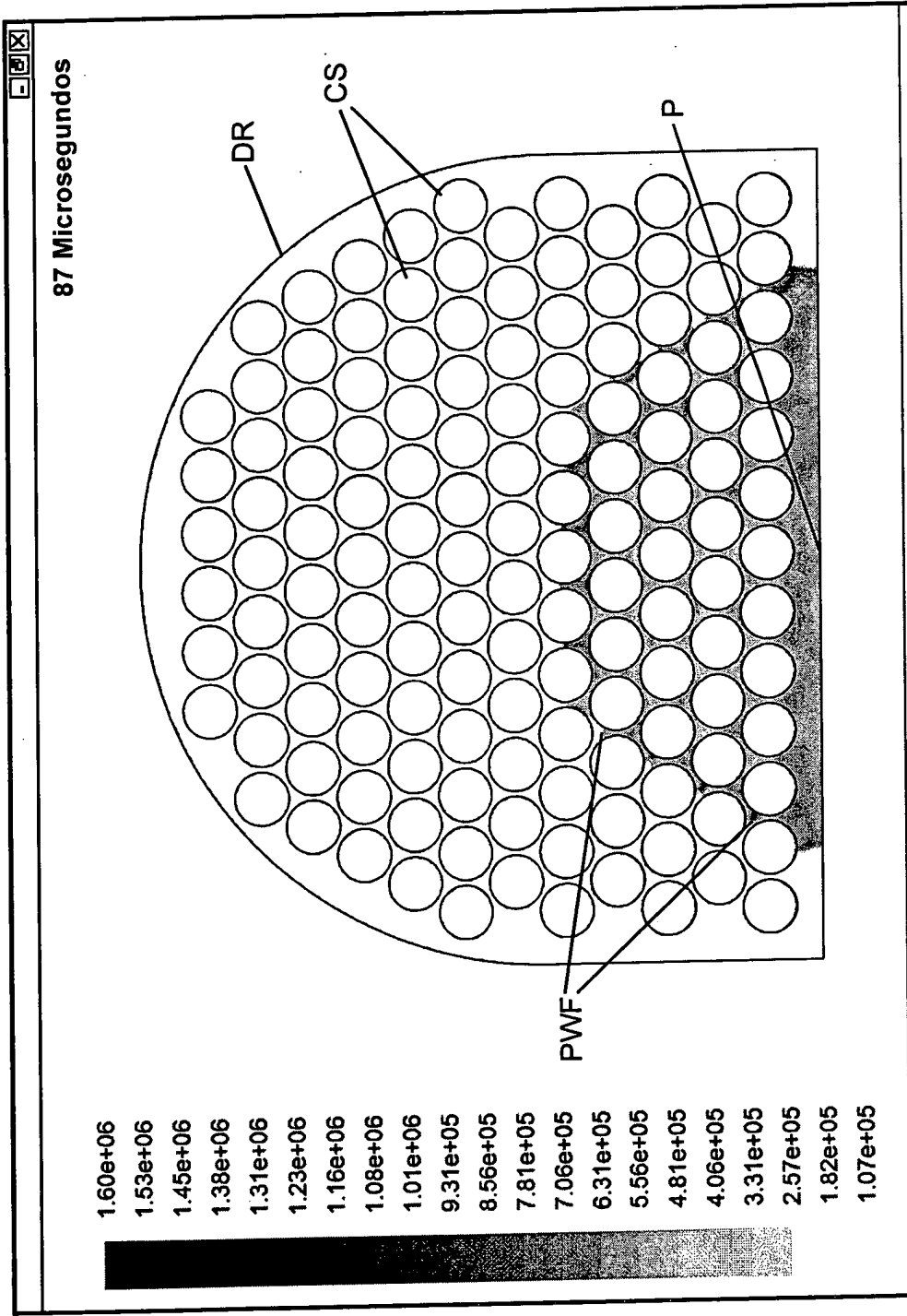


FIG. 5F



Perfis de pressão estática (pascal) (Tempo=8.6980e-05)
FLUENTE 6,3 (2d, dp, dpns exp, spe, lam não estável)

09, Dez. 2007

FIG. 5G

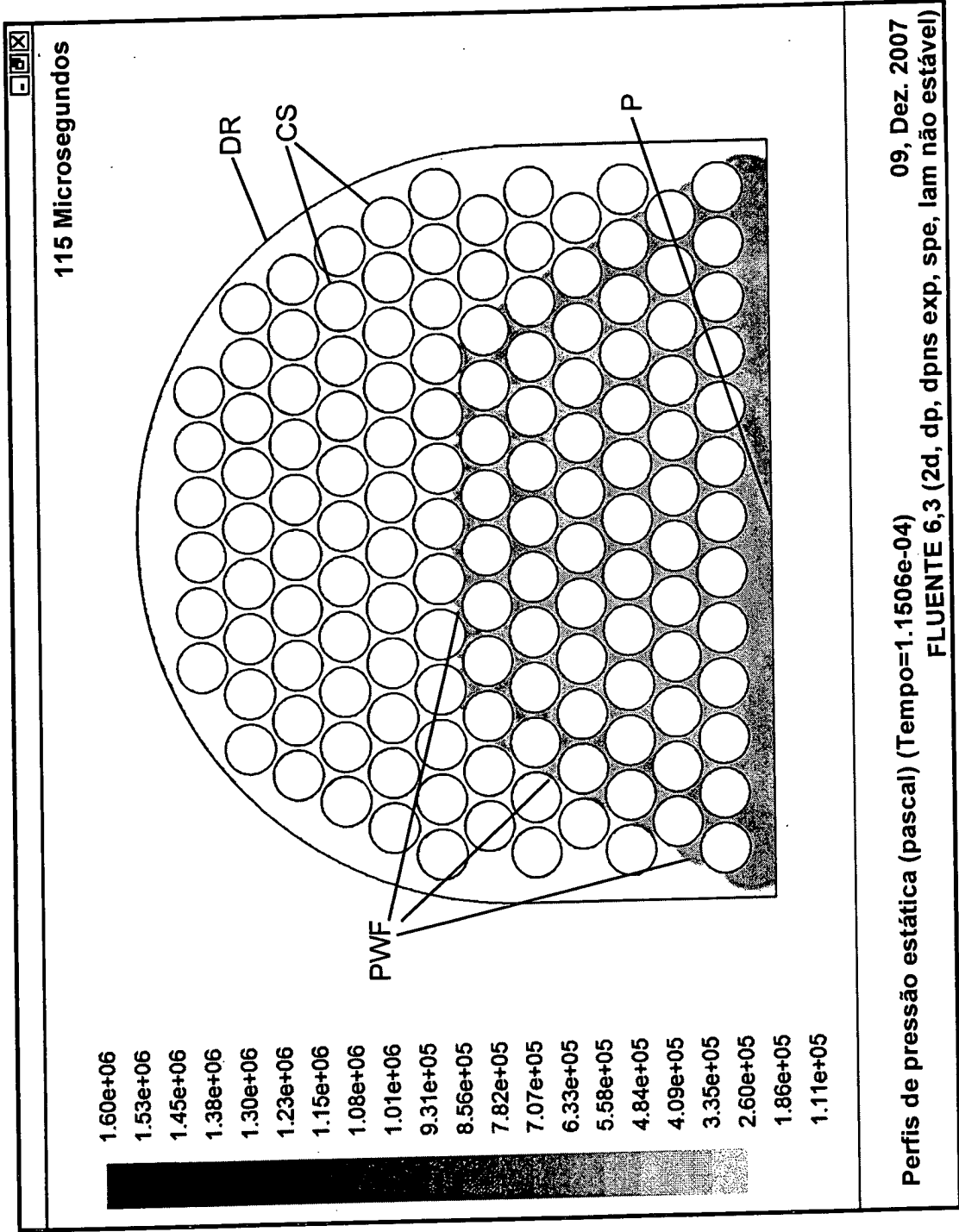


FIG. 5H

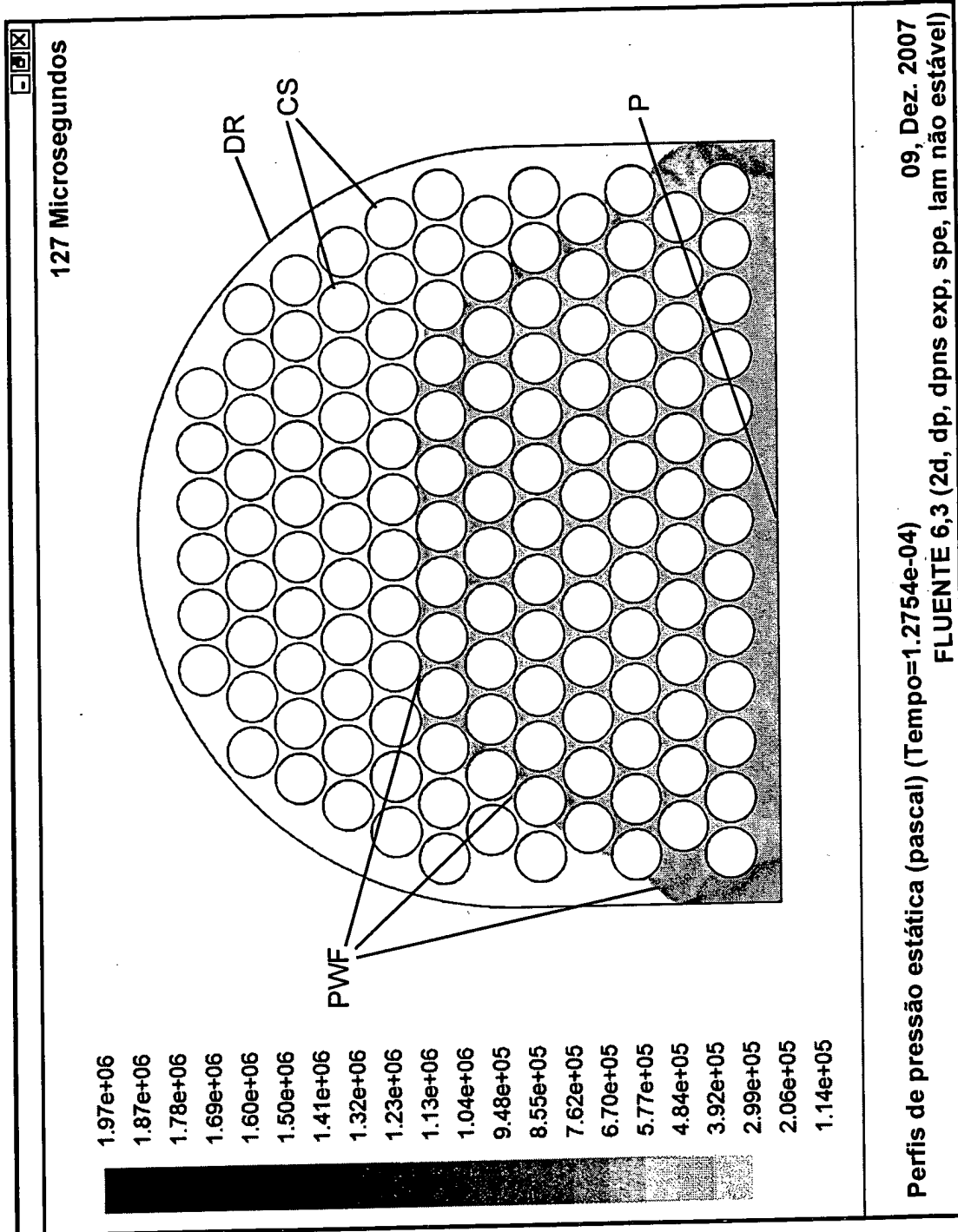
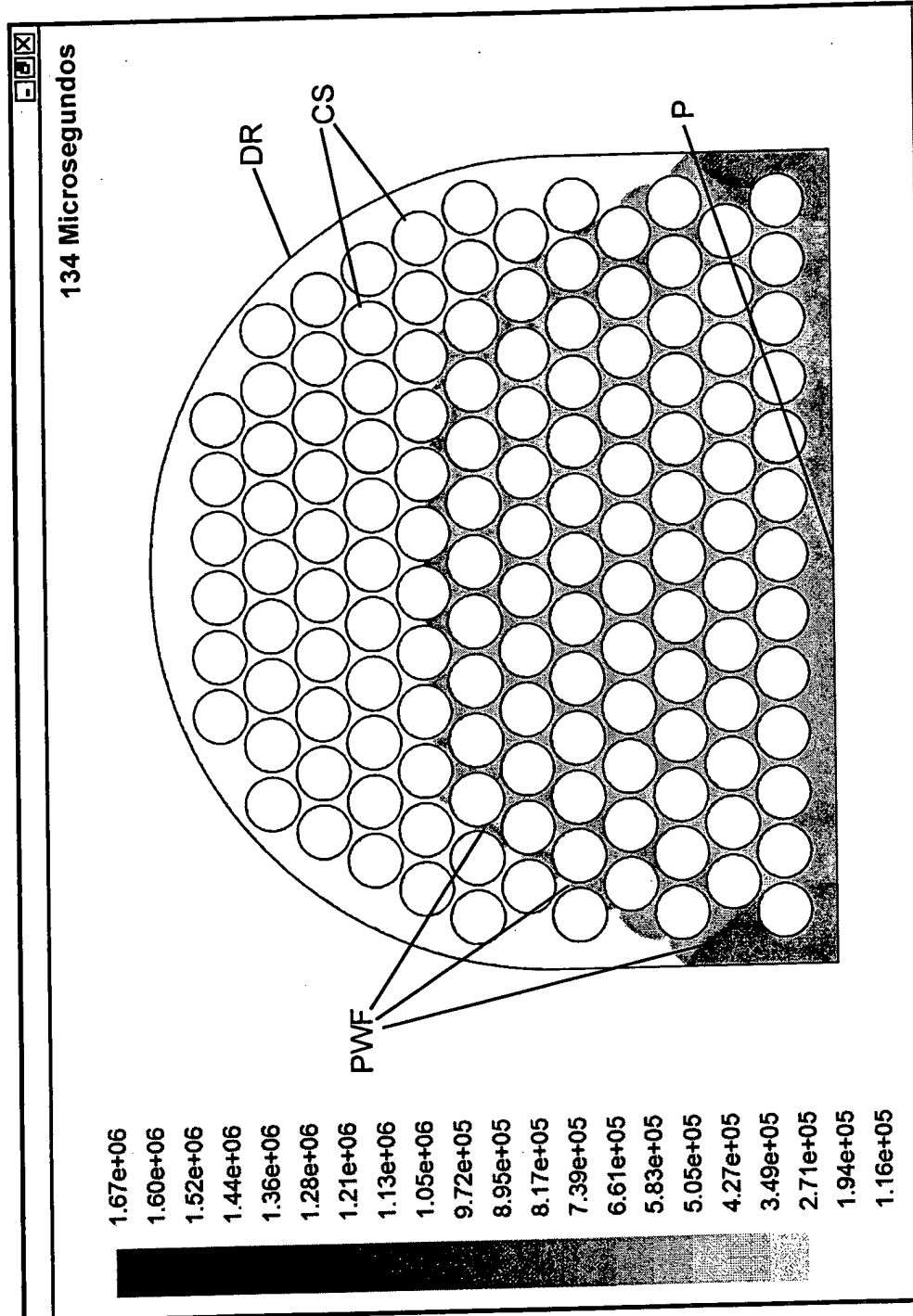


FIG. 5I

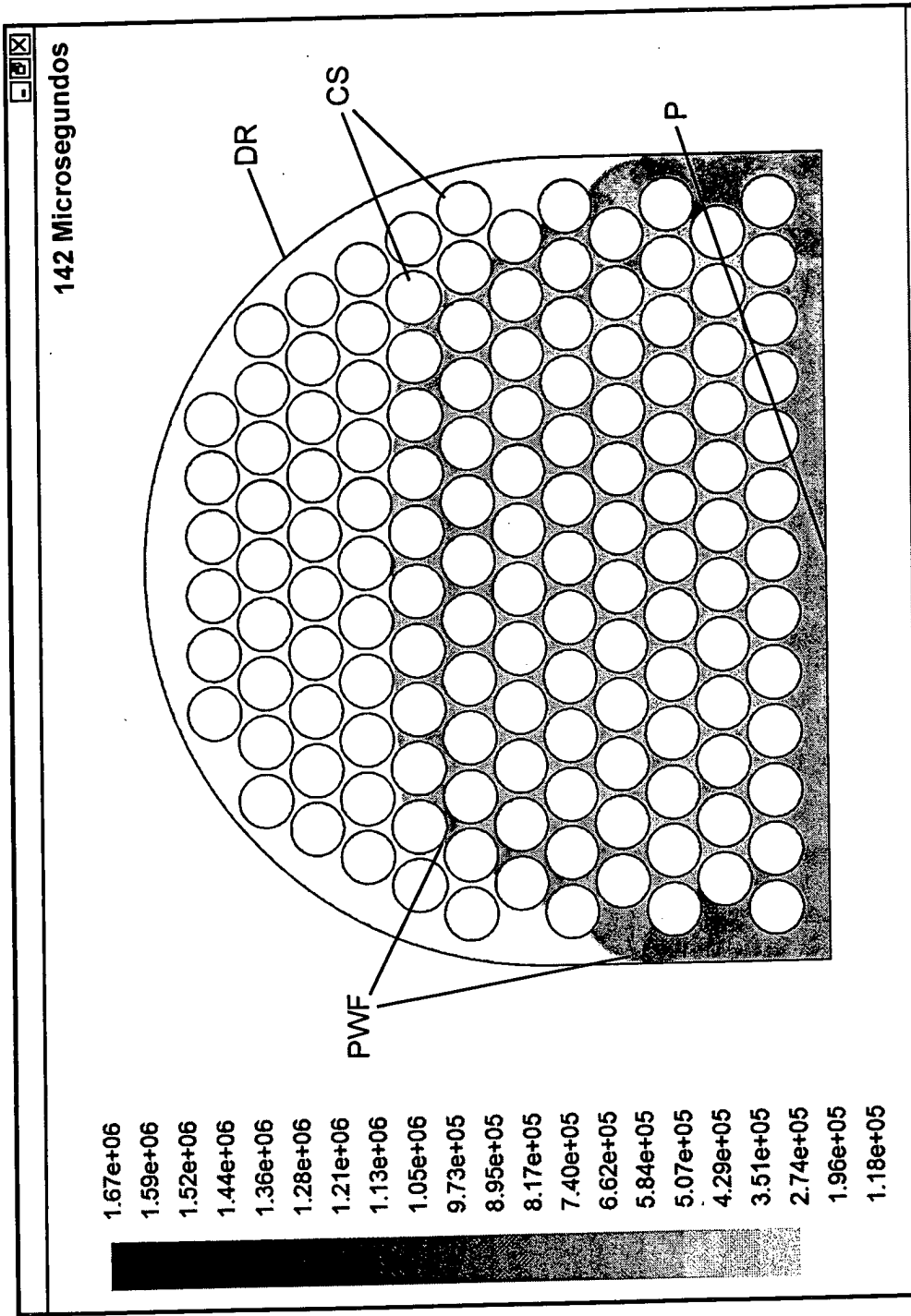


Perfis de pressão estática (pascal) (Tempo=1.3442e-04)

FLUENTE 6,3 (2d, dp, dpns exp, spe, lam não estável)

09, Dez. 2007

FIG. 5J



Perfis de pressão estática (pascal) (Tempo=1.4209e-04)
FLUENTE 6,3 (2d, dp, dpns exp, spe, lam não estável)

09, Dez. 2007

Fig. 6

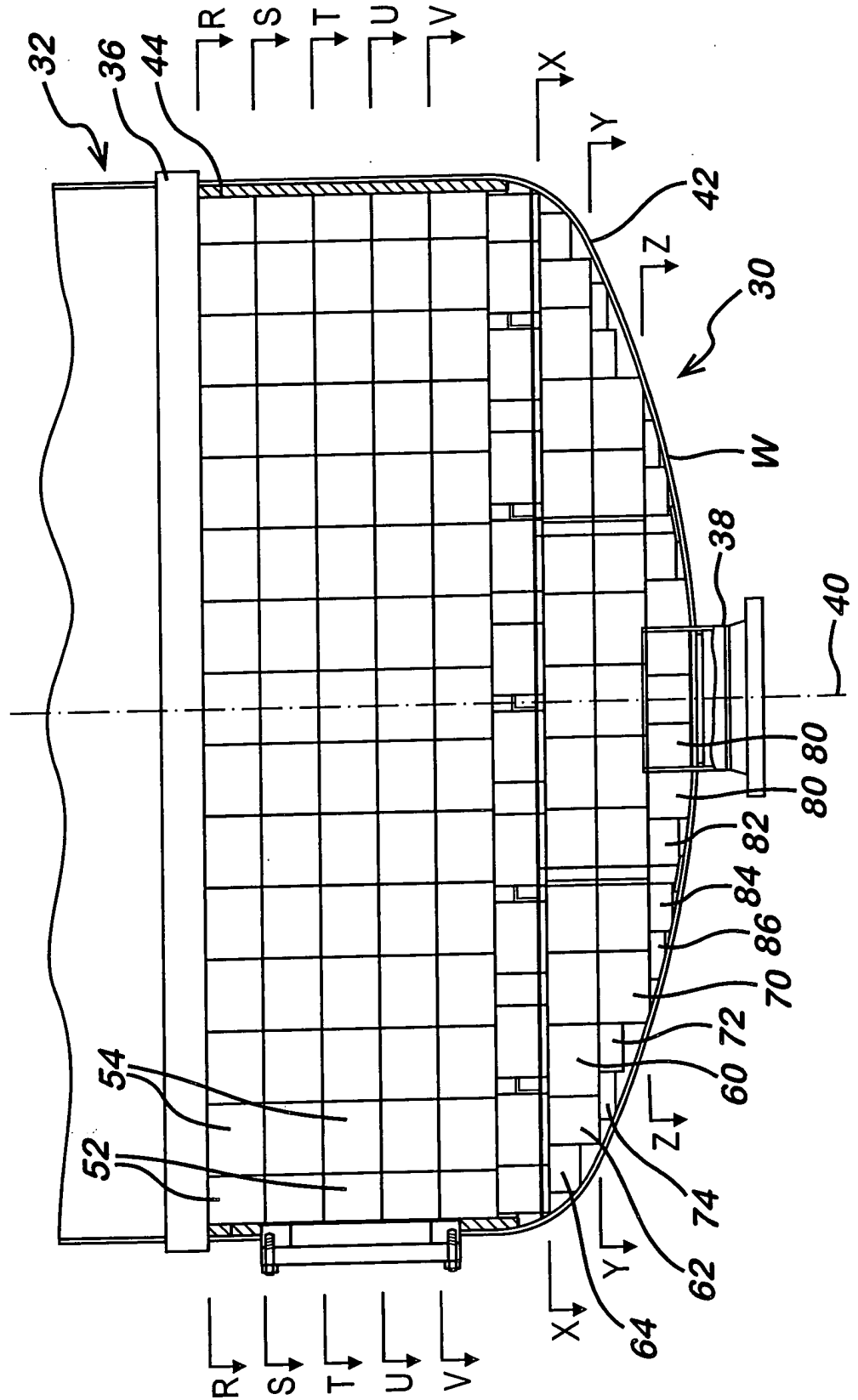


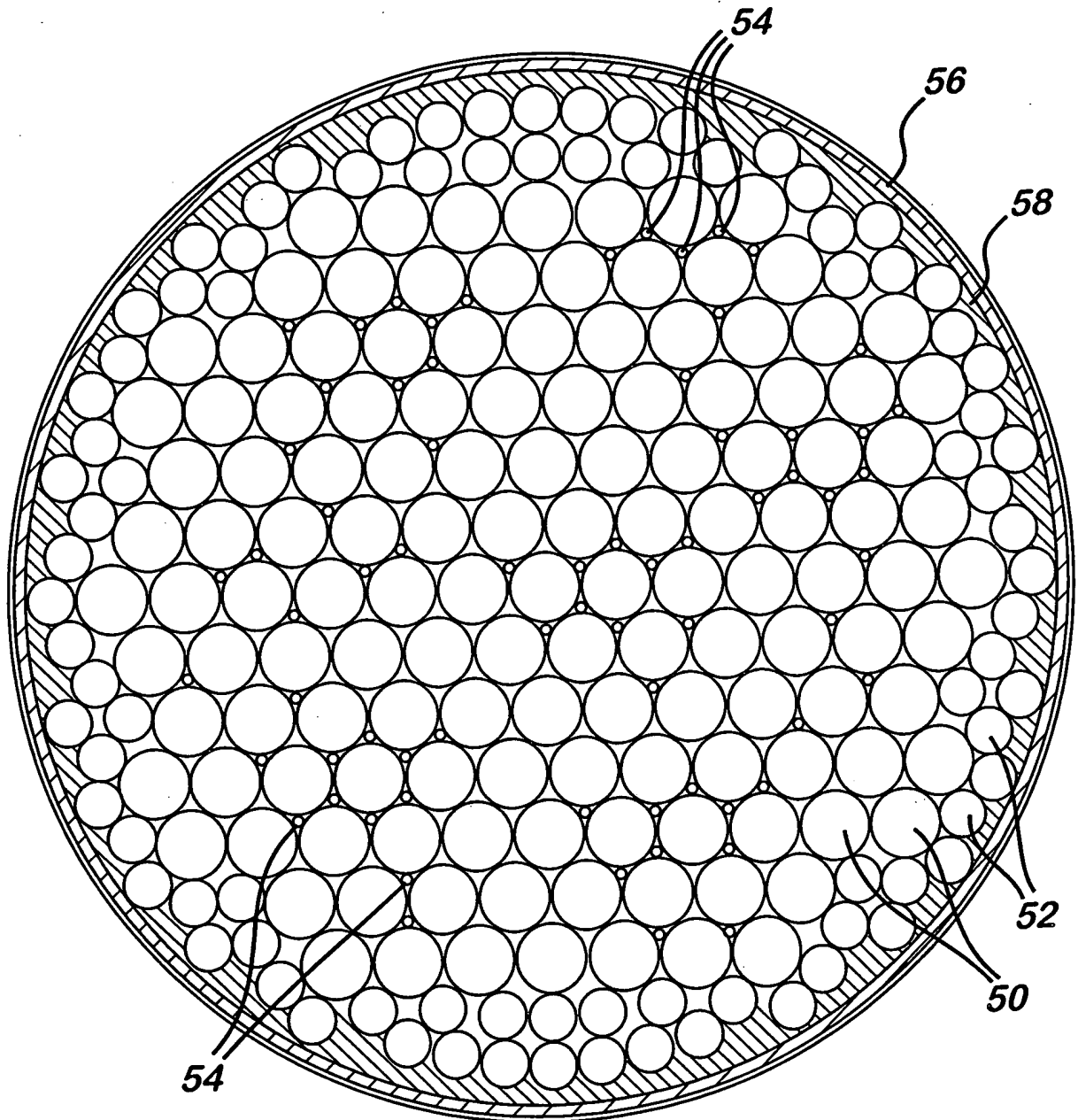
Fig. 7A

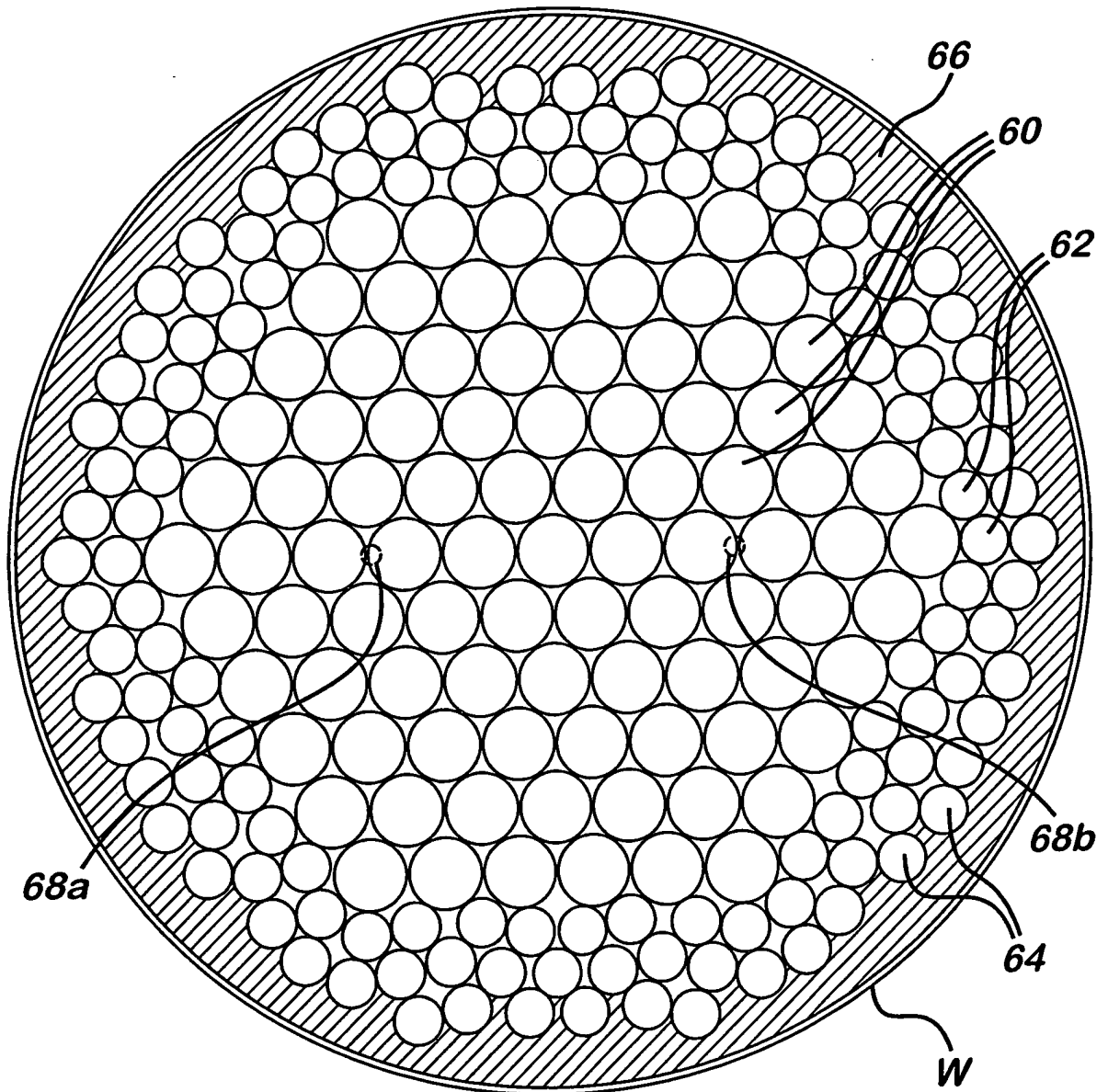
Fig. 7B

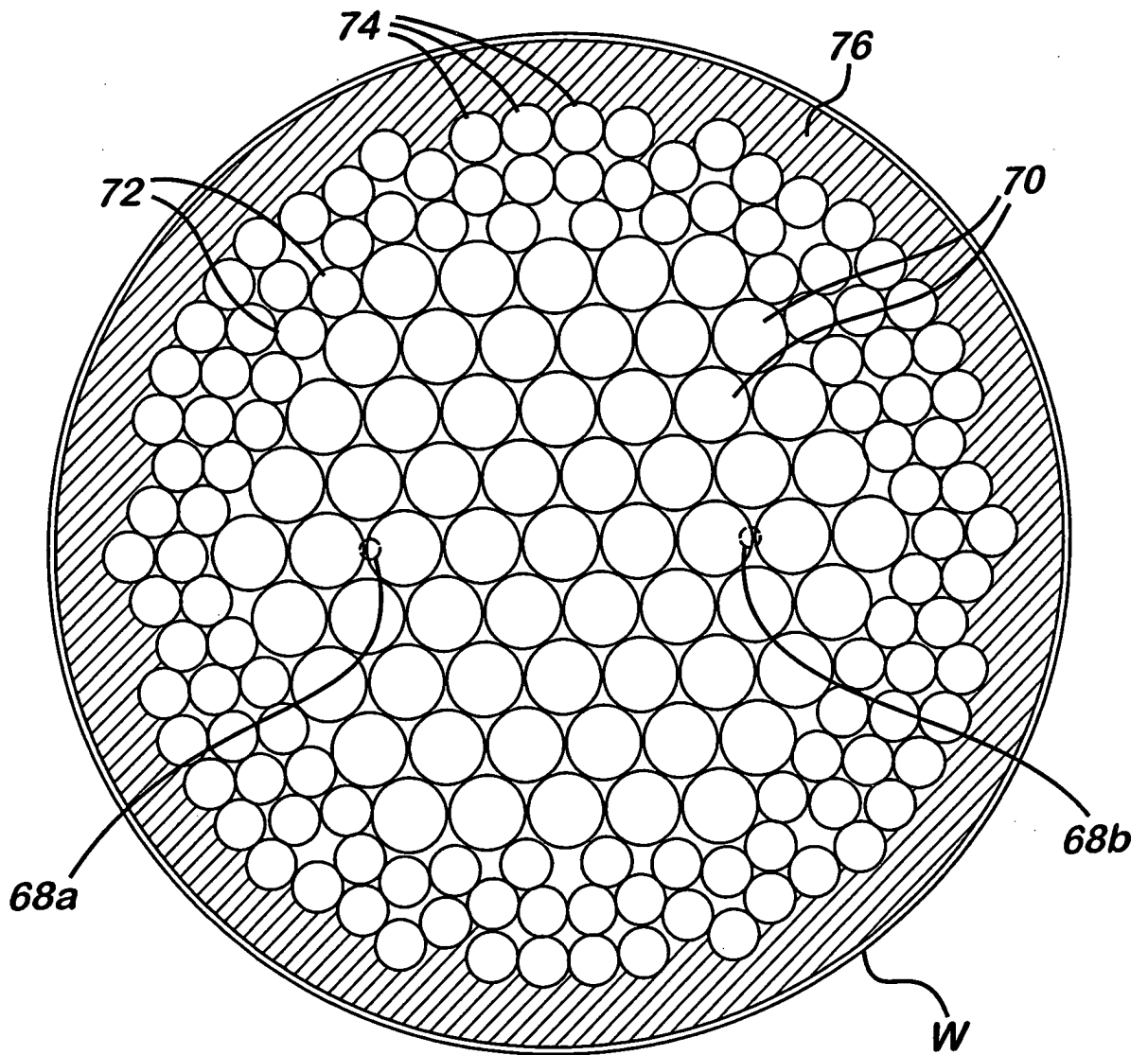
Fig. 7C

Fig. 8

Pressão de deflagração em função do tempo transcorrido

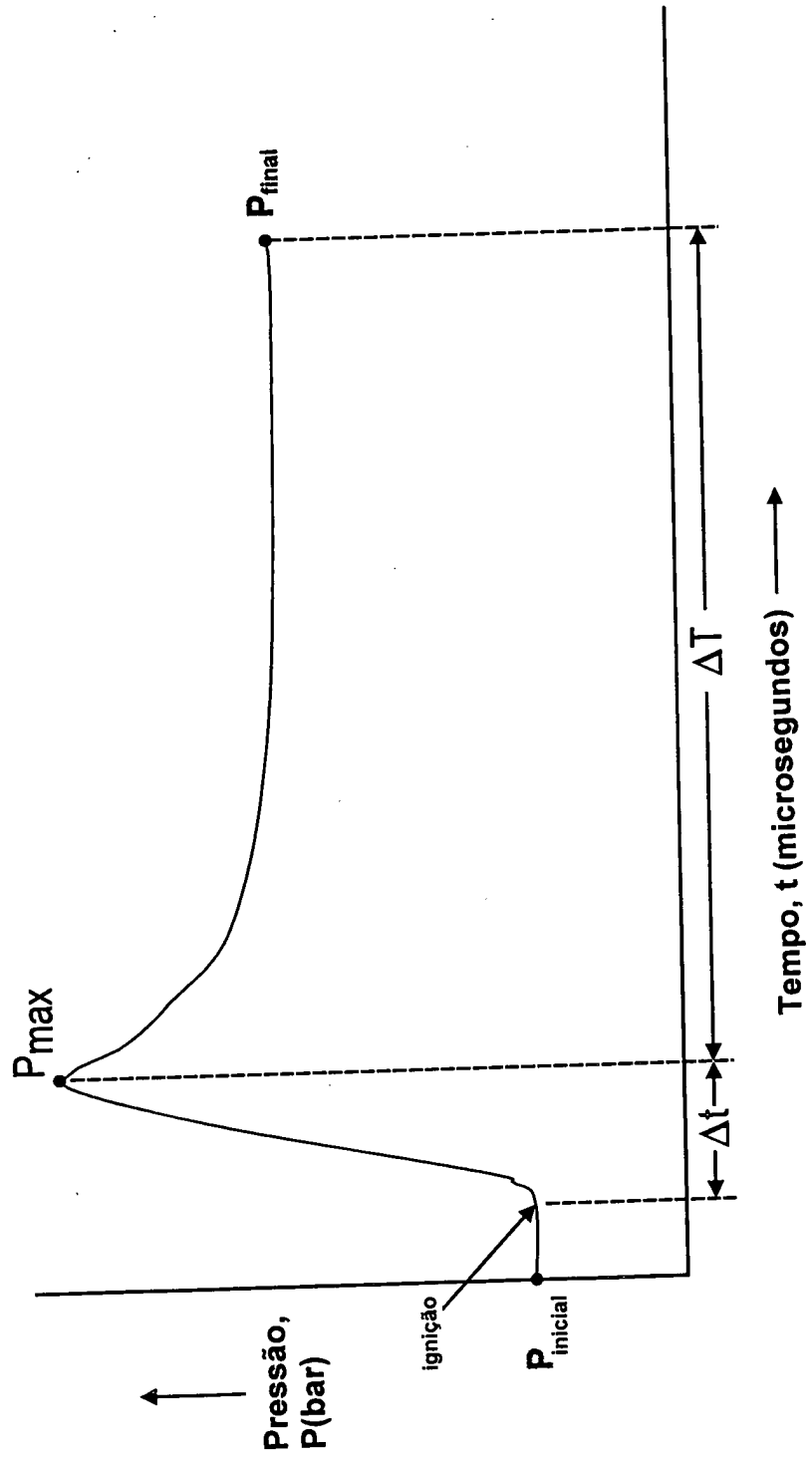


Fig. 9

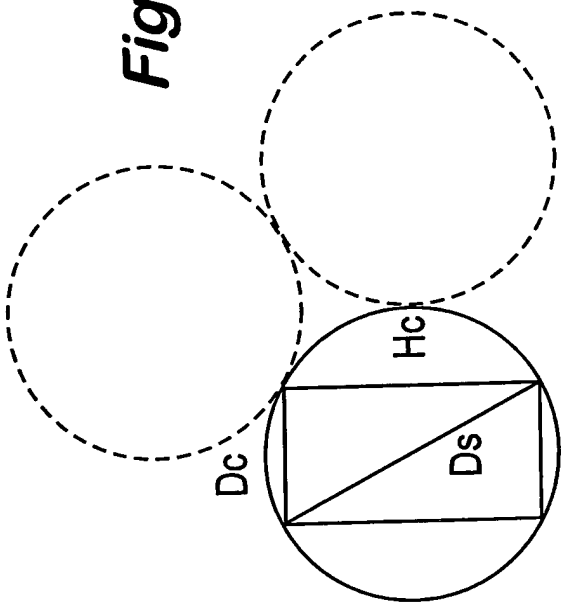


Fig. 10

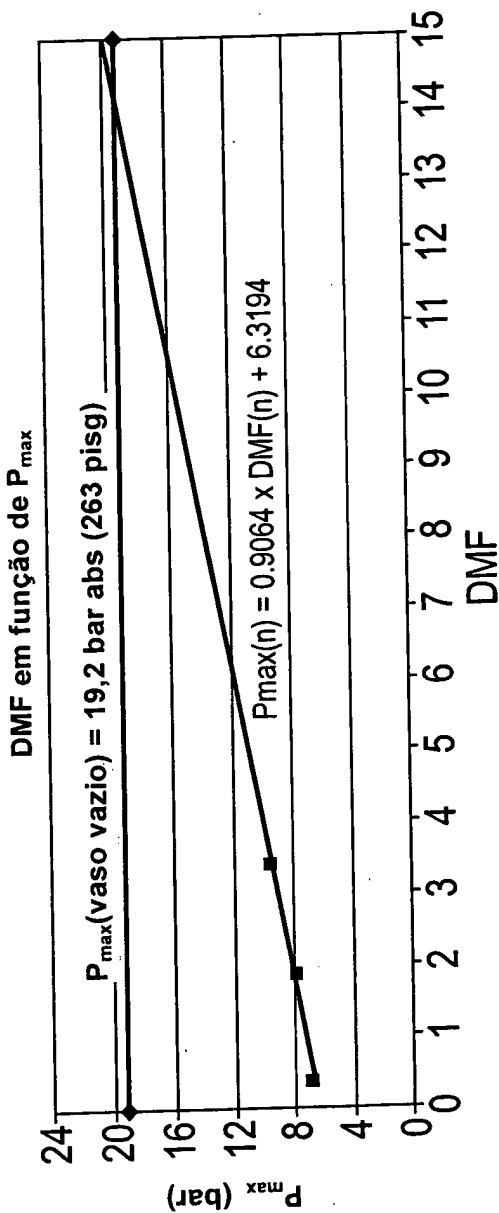
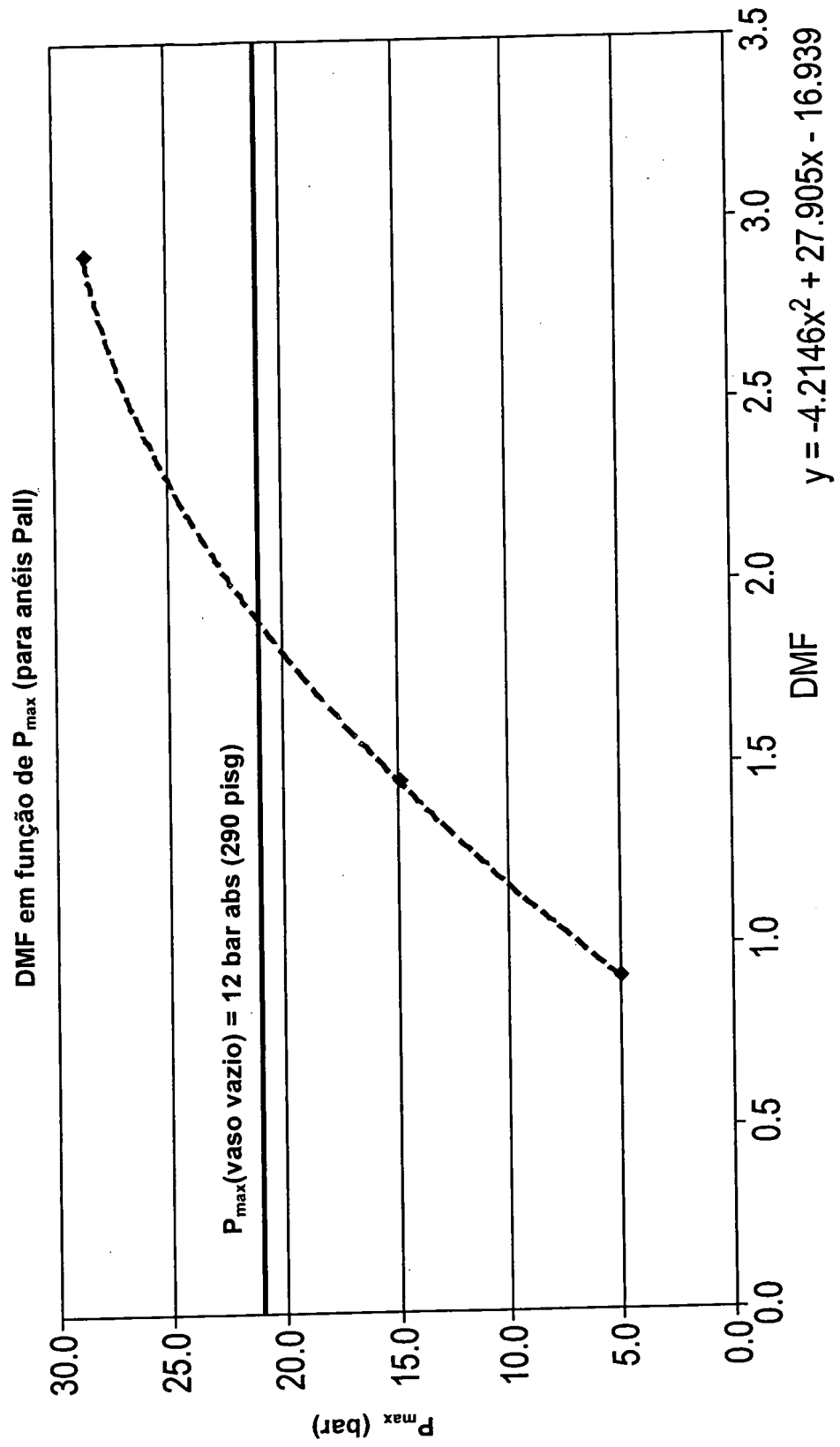


Fig. 11

RESUMO

“MÉTODO PARA ATENUAR PRESSÃO DE DEFLAGRAÇÃO
PRODUZIDA POR COMBUSTÃO DE GÁS COMBUSTÍVEL EM UMA
REGIÃO DEFINIDA DE UM VASO DE PROCESSO, REATOR
5 TUBULAR ADAPTADO PARA ATENUAÇÃO DA PRESSÃO DE
DEFLAGRAÇÃO RESULTANTE DA COMBUSTÃO DE GÁS
COMBUSTÍVEL NO MESMO, E, MÉTODO PARA REALIZAR
REAÇÕES EM FASE GASOSA SEGURAMENTE EM CONDIÇÕES
OPERACIONAIS INFLAMÁVEIS”

10 É descrito um método para atenuar pressão de deflagração
produzida por combustão do gás combustível em uma região definida de um
vaso de processo. O método, no geral, compreende selecionar e colocar
material de atenuação na região definida do vaso de processo, em que o
material de atenuação selecionado mantém sua forma física nas condições
15 operacionais. O material de atenuação deve ocupar pelo menos 20 % do
volume da região definida do vaso de processo. O uso do método inventivo
pode ser benéficamente aplicado para a operação segura de reatores de
oxidação com alimentações de alta concentração de hidrocarbonetos
inflamáveis, de maneira a atingir maior produtividade. A invenção também
20 fornece um reator tubular adaptado para atenuar a pressão de deflagração
resultante da combustão de gás combustível na região definida nele, em que a
região definida do reator tubular compreende material de atenuação
selecionado de acordo com o método anterior para atenuar pressão de
deflagração e que tem uma pluralidade de componentes que é colocada de
25 maneira tal que espaços vazios e caminhos abertos entre os componentes
sejam minimizados. Um método para realizar reações em fase gasosa
seguramente em condições operacionais inflamáveis é fornecido, em que uma
composição de alimentação de gás compreendendo um hidrocarboneto e
oxigênio é submetida a reação em um vaso de reação com materiais de

atenuação nele e a reação é conduzida a uma temperatura e uma pressão que tornam o sistema de reação inflamável. Usando o aparelho inventivo, pode-se alcançar contenção total de pressão, eliminando assim a necessidade de dispositivos de alívio de pressão de emergência.