

Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências Faculdade de Engenharia

Shyrlene Lima de Aquino Oliveira

Modelagem de dispersão atmosférica de gás odorífero (H₂S) em tocha química: estudo de caso de uma refinaria de petróleo

Rio de Janeiro 2022 Shyrlene Lima de Aquino Oliveira

Modelagem de dispersão atmosférica de gás odorífero (H₂S) em tocha química: estudo de caso de uma refinaria de petróleo

Tese apresentada, como requisito para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Saneamento Ambiental - Controle da Poluição Urbana e Industrial.

Orientador: Prof. Dr. Sergio Machado Corrêa

CATALOGAÇÃO NA FONTE

UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/B

O48	Oliveira, Shyrlene Lima de Aquino. Modelagem de dispersão atmosférica de gás odorífero (H ₂ S) em tocha química : estudo de caso de uma refinaria de petróleo / Shyrlene Lima de Aquino Oliveira. – 2022. 155f.
	Orientador: Sérgio Machado Corrêa. Dissertação (Mestrado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Engenharia.
 Engenharia ambiental - Teses. 2. Queima de gases - Sulfeto de hidrogênio - Teses. 4. Aromas - Teses. 5. Pe Refinarias - Teses. 6. Fluidodinâmica computacional - Tes Corrêa, Sérgio Machado. II. Universidade do Estado do Ri Janeiro, Faculdade de Engenharia. III. Título. 	
	CDU 662.765.4-045.52

Bibliotecária: Júlia Vieira – CRB7/6022

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Shyrlene Lima de Aquino Oliveira

Modelagem de dispersão atmosférica de gás odorífero (H₂S) em tocha química: estudo de caso de uma refinaria de petróleo

Tese apresentada, como requisito para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Saneamento Ambiental - Controle da Poluição Urbana e Industrial.

Aprovado em 4 de outubro de 2022.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Sergio Machado Corrêa (Orientador) Faculdade de Tecnologia da UERJ

Prof. Dr. Carlos André Vaz Júnior Escola de Química da UFRJ

Prof. Dr. Edmilson Pinto da Silva PETROBRAS

Prof. Dr. Leonardo Baptista Faculdade de Tecnologia da UERJ

Prof. Dr. Rodrigo Cochrane Esteves PETROBRAS

Rio de Janeiro

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimentos a todos que direta ou indiretamente me acompanharam e contribuíram para realização de mais um sonho, o título de Doutora.

Em especial, à minha mãe Marlene, pois todas as minhas conquistas são e sempre serão creditas a ela. Por ser meu exemplo de mulher e ser humano, que me inspira desde sempre a ser melhor.

À minha irmã Francilene, por ser meu porto seguro.

Ao meu Orientador Sergio Machado Corrêa, por embarcar nessa aventura, acreditar no meu trabalho e pelo respeito e paciência com que sempre me tratou.

À Daniele Cristine Rocha pela orientação e apoio nas simulações fluidodinâmicas.

Às minhas colegas doutorandas, pelo suporte mútuo, principalmente perante as dificuldades enfrentadas durante a pandemia do COVID.

E ao maior de todos, a Deus: "Obrigada Senhor, começamos juntos e terminamos juntos".

Quando se quer algo verdadeiramente e com suficiente força, acaba-se por consegui-lo sempre (Demian).

Hermann Hesse (1877-1962), escritor e pintor alemão.

RESUMO

OLIVEIRA, Shyrlene Lima de Aquino. *Modelagem de dispersão atmosférica de gás odorífero (H* $_2S$) *em tocha química:* estudo de caso em uma refinaria de petróleo. 2022. 155 f. Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2022.

A tocha é um dispositivo indispensável na indústria de petróleo e gás, que permite a combustão segura. Contudo, não é ideal para disposição rotineira de gases (incluindo tóxicos e odoríferos), visto estar sujeita a influências meteorológicas e baixo controle operacional. A modelagem matemática de dispersão atmosférica tem-se mostrado uma ferramenta muito útil para avaliar as implicações dessas queimas sobre o meio ambiente e saúde. Nesse sentido, este trabalho avaliou através de fluidodinâmica computacional (CFD), os efeitos do vento, bem como de ações operacionais na geometria da chama de uma tocha química de refinaria de petróleo, que queima temporariamente gás rico em H₂S e sua influência na dispersão atmosférica. Adicionalmente, avaliou o impacto do H₂S sobre o bem-estar (percepção de odor) da comunidade do entorno, bem como os aspectos operacionais na dispersão atmosférica. Para avaliação do odor, o modelo AERMOD foi adaptado para estimar a concentração máxima de odor por períodos muito curtos (em um intervalo de tempo de 5 s) por meio de relações pico-média. Os resultados mostraram que a detecção de H₂S, para concentração máxima absoluta, pode atingir uma taxa de probabilidade de 41 % a 3.5 km de distância da tocha com um grau de incômodo relativamente alto (3,0 UA). No entanto, alguns procedimentos operacionais podem reduzir a probabilidade de detecção de odor. No que diz respeito ao CFD, o modelo desenvolvido para obtenção da geometria da chama de tocha em escala industrial se mostra em concordância com imagem de monitoramento da chama e pode ser usado para análises de influências meteorológicas e operacionais desses sistemas.

Palavras-chave: Dispersão atmosférica. Tocha. Refinaria de petróleo. Gás ácido.

Odor. H₂S. CFD.

ABSTRACT

OLIVEIRA, Shyrlene Lima de Aquino. *Modeling of atmospheric dispersion of odorous gas (H*₂S) *in chemical flare:* case study in an oil refinery. 2022. 155 f. Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2022.

Flare is an indispensable device in the oil and gas industry, which allows the safe combustion of gases. However, it is not ideal for routine disposal of gases (including toxic and odorous), as it is subject to meteorological influences and low operational control. Mathematical modeling of atmospheric dispersion has proved to be a very useful to assess the implications of flaring on the environment and health. In this sense, this work evaluated, through computational fluid dynamics (CFD), the effects of wind, as well as operational actions on the flame geometry of an oil refinery chemical flare, which temporarily burns H₂S-rich gas and its influence on atmospheric dispersion. Additionally, it evaluated the impact of H₂S on the well-being (odor perception) of the community surrounding, as well as the operational aspects of atmospheric dispersion. For odor evaluation, the AERMOD model was used, adapted to estimate the maximum concentration and odor for very short periods (within a time interval of 5 s) through peak-mean relationships. The results showed that the detection of H₂S, for absolute maximum concentration, can reach a probability rate of 41 % at 3.5 km away from the flare with a relatively high annoyance degree (3.0 AU). However, some operating procedures may reduce the probability of odor detection. Regarding CFD, the model developed to obtain the geometry's flame of the chemical flare on industrial scale agrees with the flame monitoring image and can be used to analyze the meteorological and operational influences of these systems.

Keywords: Atmospheric dispersion. Flare. Oil refinery. Sour gas. Odor. H₂S. CFD.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Diagrama simplificado de refino	24
Figura 2 – Sistema de tocha assistida	26
Figura 3 – Tocha dominada por zonas de vigília	30
Figura 4 – Esquema de descolamento de uma chama de difusão	35
Figura 5 – Abordagem da modelagem empírica de radiação térmica	37
Figura 6 – Distorção aproximada da chama causada pelo vento lateral na velo	ocidade
de saída do jato de gás na chaminé da tocha	44
Figura 7 – Relação entre <i>SL</i> e <i>XL</i> para <i>SL</i> < 2,35	45
Figura 8 – Tipos de malha computacional: estruturada (a), não estruturada (b)) e
híbrida (c)	49
Figura 9 – Distorção de elementos da malha	50
Figura 10 – Tocha dominada por zonas de vigília	54
Figura 11 – Modelo de pluma gaussiana	65
Figura 12 – Reflexo no solo da pluma	67
Figura 13 – Diferenças entre tochas e chaminés convencionais	74
Figura 14 – Fluxo de momento e fluxo de empuxo na ascensão da pluma	74
Figura 15 – Formação e ascensão da pluma em tocha	78
Figura 16 – Stack tip downwash	84
Figura 17 – Modelo de remoção de H $_2$ S para parâmetros da tocha	85
Figura 18 – Concentração de gases odoríferos em função do tempo	97
Figura 19 - Tocha e pontos de reclamação	106
Figura 20 – Número de reclamações reportadas pelo público em 2018	106
Figura 21 – Rosa dos ventos para o período de 2018 (<i>blowing from</i>)	107
Figura 22 – Detalhe do <i>tip</i> da tocha considerado na simulação	109
Figura 23 – Domínio computacional de condições de contorno	110
Figura 24 – Malha computacional	111
Figura 25 – Detalhe da malha computacional	111
Figura 26 – PD de H ₂ S – Concentração máxima (Cenário 1)	118
Figura 27 – PD de H ₂ S – Concentração máxima (Cenário 2)	118
Figura 28 – PD de H ₂ S – Concentração máxima (Cenário 3)	119
Figura 29 – PD de H ₂ S – Concentração máxima (Cenário 4)	119

Figura 30 – Histograma de concentração de H ₂ S de 5 s (Cenário 1)121
Figura 31 – Boxplot das 1000 máximas de um ano de dados meteorológicos122
Figura 32 – Probabilidade de detecção (%) de H ₂ S – P90 (cenário 1)123
Figura 33 – Probabilidade de detecção (%) de H ₂ S – P98 (cenário 1)124
Figura 34 – Probabilidade de detecção (%) de H ₂ S – P99 (cenário 1)124
Figura 35 – Principais efeitos sobre a concentração de H_2S no nível do solo a partir
de interações entre variáveis de entrada128
Figura 36 – Extremidade das tochas130
Figura 37 – Previsão CFD mostrando perfil 3D de fração mássica de CO versus
imagem de monitoramento da chama131
Figura 38 – Perfis de fração mássica de CO na chama (com escala limitada a 0,01)
A) velocidade de vento de 1,2 m s ⁻¹ B) velocidade de vento de 3,5 m s ⁻¹ 133
Figura 39 – Distribuição de temperatura obtida na simulação numérica A) velocidade
de vento de 1,2 m s ⁻¹ B) velocidade de vento de 3,5 m s ⁻¹ 133
Figura 40 – Perfis de fração mássica de CO na chama (com escala limitada a 0,01)
A) Cenário operacional real B) Cenário operacional ótimo135
Figura 41 – Distribuição de temperatura obtida na simulação numérica A) Cenário
operacional real B) Cenário operacional ótimo135

LISTA DE TABELAS

Tabela 27 – Planejamento fatorial para obtenção da concentração mínima de Ha	<u>'</u> S
(concentrações máximas absolutas)	126
Tabela 28 – Pseudoparâmetros e condições de descarga para cada teste	127
Tabela 29 – Parâmetros de entrada para a modelagem de dispersão atmosférica	a
para diferentes velocidades de vento	132

LISTA DE ABREVIATURAS

AA	Água Ácida
API	American Petroleum Institute
CAPP	Canadian Association of Petroleum Producers
CR	Coqueamento Retardado
DD	Destilação Direta
DEA	Dietanolamina
IDNR	Iowa Department of Natural Resources
FCC	Fluid Catalytic Cracking
FV	Fator de Vista
GC	Gás Combustível
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo
HC	Hidrocarboneto
HCC	Hidrocraqueamento Catalítico
HDM	Hidrodemetalização
HDN	Hidrodenitrogenação
HDO	Hidrodesoxigenação
HDR	Hidrorrefino
HDS	Hidrodessulfurização
HDT	Hidrotratamento
ISO	International Standards Organization
LII	Limite Inferior de Inflamabilidade
LSI	Limite Superior de Inflamabilidade
MOE	Ontario Ministry of Environment
NDDH	North Dakota Department of Health
OEPA	OHIO Environmental Protection Agency
PCI	Poder calorífico Inferior
PCS	Poder calorífico Superior
U.S.EPA	United States Environmental Protection Agency
URE	Unidade de Recuperação de Enxofre
UTAA	Unidade de Tratamento de Águas Ácidas
WHO	World Health Organization

LISTA DE VARIÁVEIS

Δh	Ascensão da pluma (m)
η	Eficiência de combustão (%)
$ ho_a$	Massa específica do ar (kg m ⁻³)
$ ho_f$	Massa específica do gás da tocha (kg m ⁻³)
$ ho_s$	Massa específica da fonte (kg m-3)
C _{pa}	Calor específico do ar (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
C_{pf}	Calor específico do gás da tocha (J kg ⁻¹ K ⁻¹)
C _{ps}	Calor específico médio de T_s a T_a na fonte (J/ kg ⁻¹ K ⁻¹)
D_f	Diâmetro real da tocha (m)
D_s	Diâmetro real da fonte (m)
D_s^*	Diâmetro virtual da tocha (m)
F	Fração de calor irradiado
F _{pluma}	Fração de calor liberada da pluma
F_{bp}	Fluxo de empuxo da pluma (m ⁴ s ⁻³)
F _{bs}	Fluxo de empuxo da fonte (m ⁴ s ⁻³)
F _{ms}	Fluxo de momento da fonte (m ⁴ s ⁻²)
F_{mf}	Fluxo de momento do gás da tocha (m ⁴ s ⁻²)
g	Aceleração da gravidade (m s ⁻²)
h	Altura <i>lift off</i> (m)
H _a	Taxa líquida de calor liberado (J s ⁻¹)
h_f	Altura vertical da chama (m)
H _s	Altura efetiva de liberação da pluma na fonte
h_s	Altura real da fonte (m)
H_s^*	Altura virtual da tocha (m)
H_t	Taxa bruta de calor liberado (J s ⁻¹)
L	Comprimento de chama (m)
M _a	Massa molecular do ar (kg kmol ⁻¹)
M_f	Massa molecular do gás da tocha (kg kmol-1)
M _s	Massa molecular da fonte (kg kmol ⁻¹)

\dot{m}_s	Vazão mássica da fonte (kg s ⁻¹)
\dot{m}_f	Vazão mássica do gás da tocha antes da combustão (kg s-1)
PCI _f	Poder calorífico inferior do gás da tocha antes da combustão (@ 20
	°C e 1 atm) (Btu sfc ⁻¹)
PCI_f^0	Poder calorífico inferior do gás da tocha antes da combustão (@ 15
	°C e 101,325 kPa) (J kg ⁻¹)
PCI _{zc}	Poder calorífico inferior do gás na zona de combustão ($@$ 20 °C e 1
	atm) (Btu sfc ⁻¹)
R _i	Número de Richardson
R _u	Constante Universal dos gases 8,3145 (kPa m³) (K ^{-1.} kmol ⁻¹))
U _a	Velocidade média de vento (m s ⁻¹)
U_f	Velocidade real de saída do gás da tocha (m s ⁻¹)
Us	Velocidade de saída da fonte (m s ⁻¹)
U_s^*	Velocidade virtual da tocha (m s ⁻¹)
V_{s}	Vazão volumétrica da fonte (m ³ s ⁻¹)
T _a	Temperatura ambiente (K)
T_s	Temperatura na fonte (K)
T_f	Temperatura do gás da tocha antes da combustão (K)

SUMÁRIO

INTROD	UÇÃO	17
OBJETI	VOS	20
1.1	Objetivo geral	20
1.2	Objetivos específicos	20
1.3	Organização da tese	21
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	22
2.1	Hidrorrefino (HDR)	22
2.2	Bloco de enxofre	23
2.3	Sistema de tocha	25
2.4	Eficiência da combustão em tochas	28
2.4.1	Influência dos gases inertes na combustão	30
2.4.2	Influência de gotículas líquidas na combustão	
2.5	Tipos de chama e suas características	
2.5.1	Jatos de fogo	
2.5.2	Dimensões da chama	
2.5.2.1	Comprimento de chama	40
2.5.2.2	Comprimento visível e químico da chama	41
2.5.2.3	Trajetória e deslocamento da chama	43
2.5.3	Emissividade	46
2.6	Fluidodinâmica computacional	47
2.6.1	Malhas computacionais	48
2.6.2	Turbulência	51
2.7	Modelagem da combustão em tochas	52
2.7.1	Equações de governo	54
2.7.2	Modelo de turbulência SST k – ω (Shear-Stress Transport k- ω)	55
2.7.3	Modelos de combustão aplicáveis	58
2.7.3.1	Non-premixed model (mixture fraction + PDF)	58
2.7.3.2	Laminar Flamelet Model (LFM)	59
2.7.3.3	Eddy Dissipation model (EDM)	60
2.7.3.4	Eddy Dissipation Concept model (EDC)	60
2.7.3.5	Composition PDF transport model	61

2.7.4	Modelos de radiação térmica	.62
2.7.4.1	Modelo de Radiação das Ordenadas Discretas (OD)	.63
2.8	Modelos de dispersão atmosférica	.64
2.8.1	Industrial Source Complex (ISC)	.69
2.8.2	Modelo AERMOD	.70
2.8.3	Modelo CALPUFF	.71
2.9	Modelagem da dispersão de poluentes em tocha	72
2.9.1	Fluxo de empuxo na fonte (<i>Fbs</i>)	.75
2.9.2	Fluxo de momento da fonte (<i>Fms</i>)	.78
2.10	Metodologias existentes para modelagem em tocha	. 79
2.10.1	Planilha AERflare	.82
2.10.1.1	Stack tip downwash	.84
2.10.1.2	Eficiência de combustão (AER, 2021)	.85
2.10.1.3	Pseudoparâmetros	.86
2.11	Odor e percepção odorante	.89
2.11.1	Características do odor	.90
2.11.2	Fatores que afetam o impacto odorante	.91
2.11.3	Fontes e principais compostos odoríferos em refinarias de petróleo	.92
2.11.4	Odor e efeitos para a saúde	.94
2.12	Avaliação de impacto ambiental de emissões odorantes	96
2.12.1	Modelagem da dispersão atmosférica de odor	.96
2.12.2	Avaliação do impacto odorante em campo	.99
3	METODOLOGIA	101
3.1	Caracterização da área de estudo	101
3.2	Sistema de tocha química	101
3.3	Caracterização das correntes enviadas para a tocha	102
3.3.1	Inventário de emissões	105
3.4	Histórico de reclamações	105
3.5	Caracterização meteorológica	106
3.6	Configuração do modelo de dispersão atmosférica	108
3.7	Modelagem numérica	108
3.7.1	Desenvolvimento do modelo	108
3.7.2	Métodos de CFD para simulação numérica em tochas	111
3.7.3	Design de experimentos	112

4	Resultados e discussões	113
4.1	Modelagem de dispersão atmosférica de H ₂ S no AERMOD	113
4.1.1	Valores de máxima concentração de H ₂ S no nível do solo	113
4.1.2	Resultados relativos a percentis	122
4.2	<i>Design</i> de experimentos	125
4.3	Modelagem CFD	129
4.3.1	Validação da modelagem numérica	129
4.3.2	Simulação numérica: condições operacionais e velocidades de vento	132
CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES137		
SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS139		
REFERÊNCIAS140		

INTRODUÇÃO

Tochas ou *flares* são equipamentos de combustão utilizados em plantas industriais, principalmente na indústria de óleo e gás. Os gases a serem queimados são coletados através de grandes tubulações chamadas de "*headers*" e são direcionados para a chaminé da tocha (ZAREI; EZADI, 2020). Em geral, há queimas rotineiras de pequenos volumes de gás, tecnicamente difíceis de recuperar ou pouco rentáveis. Contudo, a tocha, tem como principal objetivo ser uma medida de disposição segura de grande quantidade de gases residuais durante emergências, bem como em partidas e paradas programadas da planta industrial, por curto período de tempo (CANADIAN ASSOCIATION OF PETROLEUM PRODUCERS, 2013).

Os gases residuais podem ser constituídos por hidrocarbonetos (HC) ou uma mistura que contém desde hidrogênio (H₂) a HCs pesados (parafinas acima do metano, olefinas e aromáticos), os quais podem liberar vapores potencialmente tóxicos, tais como benzeno, sulfeto de hidrogênio (H₂S) e amônia (NH₃) (BADER; BAUKAL; BUSSMAN, 2011; CAPP, 2013).

Nesse sentido, a correta disposição dessas emissões cada vez mais é foco de preocupação, visto os petróleos processados, principalmente no Brasil, serem mais pesados (menor °API) e com elevados teores de contaminantes (como enxofre, nitrogênio e metais). Em concomitância, observa-se uma crescente restrição às emissões atmosféricas, imputando à indústria de refino de petróleo especificações cada vez mais restritivas (SCHWEITZER; LOPEZ-GARCIA; FERRE, 2010), levando as refinarias a investirem em parques mais complexos, principalmente em unidades de Hidrorrefino (HDR) (MEDEROS et al., 2006), cuja operação leva a um aumento dos inventários de H₂S e NH₃.

A tocha pode servir como disposição temporária desses gases, quando da indisponibilidade de equipamentos de controle ambiental, por exemplo, da Unidade de Recuperação de Enxofre (URE) (GUIMARÃES, 2006; PETROBRAS, 2002). Contudo, sua eficiência de queima pode variar de 62 a 82 %, dependendo da vazão de combustível, teor de líquido nos gases aliviados e condições meteorológicas (STROSHER, 2000). Entre os parâmetros meteorológicos, os fortes ventos cruzados, que provocam o *downwash* da chama, permitem que os gases liberados escapem da

zona de combustão (JOHNSON; KOSTIUK, 2000; JOHNSON; KOSTIUK, 2002; KOSTIUK; JOHNSON; THOMAS, 2004) e emitam H₂S não queimado para a atmosfera.

O H₂S é um gás incolor que se caracteriza por um odor de ovo podre. Além dos problemas relacionados à saúde, esse poluente também tem potencial odorífero e corrosivo. Para H₂S, o limiar de odor (concentração mínima de uma substância necessária para a detecção em uma proporção da população, geralmente 50 %) varia de 0,0005 a 0,3 ppm (U.S.EPA, 1992). Uma exposição anual superior a 4 μ g m⁻³ de H₂S está ligada ao aborto espontâneo em humanos e animais (HEMMINKI; NIEMI, 1982) e a menor concentração de efeito adverso observado é de 0,15 mg m⁻³ em um período médio de 24 horas (WHO, 2000).

A modelagem matemática pode ser utilizada tanto na avaliação da dispersão atmosférica de H₂S, quanto na obtenção da geometria da chama em tocha, parâmetro importante para estimativa de eficiência de queima e consequentemente nos resultados de concentração de poluentes no nível do solo.

Modelos computacionalmente simplificados de plumas gaussianas podem auxiliar na avaliação do H₂S, visto que é possível verificar a abrangência do impacto na saúde e bem-estar dos trabalhadores e comunidades no entorno de uma planta industrial. Zadakbar et al. (2011) avaliaram os efeitos tóxicos de SO₂ e H₂S no entorno de uma instalação de processamento de gás, a partir da modelagem de dispersão desses gases usando o AERMOD (modelo padrão de dispersão atmosférica) em condição normal de queima e em *flame out* (apagamento da chama), respectivamente. No que diz respeito ao odor, a modelagem de dispersão atmosférica tem sido aplicada comumente em estações de tratamento de esgoto (COOPER et al., 2001; LATOS et al., 2011) e granjas de suínos (LATOS et al., 2010; KARAGEORGOS et al., 2010). Contudo, não há muitos estudos avaliando a dispersão de H₂S não queimado, durante condição normal de queima em tochas (*normal flaring*).

Para obtenção da morfologia da chama, modelos mais exigentes computacionalmente, baseados em CFD, permitem resultados mais precisos do que modelos integrais simplificados.

Nesse contexto, este trabalho avalia o impacto de diferentes velocidades de vento, bem como ações operacionais na morfologia da chama de gás ácido em tocha química de uma refinaria de petróleo e sua influência nos parâmetros de entrada de modelos de dispersão, a partir de CFD. Adicionalmente, através de modelo gaussiano,

avalia o impacto da queima do gás ácido sobre o bem-estar (odor) da população. O estudo de dispersão trata a tocha como "fonte pontual modificada" para avaliar a dispersão de H₂S considerando a realidade climatológica da região, bem como avalia a influência de fatores operacionais e suas interações nos resultados da modelagem.

OBJETIVOS

1.1 Objetivo geral

Avaliar a dispersão atmosférica de H₂S bruto (não queimado) emitido por uma tocha química de uma refinaria de petróleo, que recebe temporariamente gás ácido (rico em H₂S e NH₃) para combustão, visando identificar seu impacto no bem-estar (percepção de odor) nos trabalhadores e comunidades de entorno.

1.2 Objetivos específicos

- Fornecer consistência nos cálculos dos parâmetros de entrada para uso em modelos padrão de dispersão de gases, específico para fonte tocha, considerando a ineficiência da queima;
- Utilizar modelo matemático existente para o cálculo da eficiência geral da combustão em tochas a partir de correntes gasosas e correntes contendo gotículas líquidas de água;
- Avaliar a estabilidade da chama, através de análise da velocidade de saída, Poder Calorífico Inferior (PCI) e Limite Inferior de Inflamabilidade (LII) do gás aliviado.
- Contribuir para a compreensão dos mecanismos que causam as ineficiências na chama;
- Verificar os efeitos da presença de inertes na eficiência da combustão e impactos na dispersão atmosférica;
- Definir estrutura hierárquica das principais medidas operacionais que influenciam as concentrações de H₂S no nível do solo e suas possíveis interações;
- Estimar a Probabilidade de Detecção de odor (PD) e Grau de Incômodo (GI) em pontos receptores específicos (principais pontos de reclamações) no entorno da Refinaria;

- Confrontar os resultados da modelagem com o histórico de reclamações devido ao odor, indicando a melhor estratégia para fins de comparação;
- Estabelecer o modelo mais adequado para simulação de gases, a partir das especificidades dos poluentes estudados;
- Investigar a capacidade dos modelos CFD existentes implementados no solver FLUENT para prever a morfologia da chama em ventos cruzados para combustão de gás ácido;
- Validar modelo CFD para escala industrial de tochas químicas queimando gás ácido;
- Através da modelagem em CFD, verificar os efeitos de diferentes velocidades de vento, bem como ações operacionais na morfologia da chama e sua correlação com os parâmetros de entrada em modelos de dispersão.

1.3 Organização da tese

A seguir será mostrado que o presente trabalho está dividido em 03 seções:

Seção 1 – Levantamento bibliográfico, com exposição dos fundamentos teóricos que subsidiaram a tese, através de conceitos e aspectos relacionados a sistemas de tocha, modelagem matemática, dispersão atmosférica, combustão em tocha e odor.

Seção 2 – Apresenta a metodologia aplicada, abrangendo a área de estudo, dados de projeto e operação do sistema de tocha e opções de controle do modelo de dispersão e de CFD.

Seção 3 – Esta seção busca exibir os resultados obtidos nas simulações, análise estatística dos dados, suas correlações e demais discussões pertinentes.

Ao final, são apresentados as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Hidrorrefino (HDR)

O Hidrorrefino (HDR) é um conjunto de processos químicos presente na indústria do petróleo para tratar suas frações, inclusive para o craqueamento daquelas mais pesadas. Embora seja um processo consolidado, ainda apresenta crescente importância em um cenário muito dependente desta tecnologia, frente às constantes exigências por produtos de maior qualidade (RANA et al., 2007). Isso significa ganho de desempenho dos produtos finais, em função de melhorias de suas propriedades físico-químicas, associado à mitigação de problemas ambientais e de saúde devido à redução do teor de contaminantes.

Os processos de Hidrotratamento (HDT) e Hidrocraqueamento Catalítico (HCC) são subdivisões do HDR e ambos são processos catalíticos heterogêneos. O HDR consiste em reações com consumo de H₂ na presença de catalisador sólido. Essas reações envolvem a hidrogenólise, geralmente a cisão de uma ligação carbonoheteroátomo (S, N, O, Metal) pela ação do H₂. São elas a Hidrodessulfurização (HDS), Hidrodenitrogenação (HDN), Hidrodesoxigenação (HDO) e Hidrodemetalização (HDM) para remoção de enxofre, nitrogênio, oxigênio e metais, respectivamente (FURIMSKY, 1998). Esse processo, após a remoção de impurezas presentes no combustível e hidrogenação catalítica de moléculas insaturadas, garante a estabilidade do produto tratado, conferindo-lhe especificação como combustível ou preparando essas correntes para outros processos de refino (DIETZ, 2014).

O HDT é responsável pelo ajuste de propriedades e especificação de produtos. O HCC converte frações mais pesadas em outras mais leves, igualmente removendo contaminantes e gerando produtos com qualidade superior. Estão sujeitos aos processos de HDT as correntes de destilação direta (DD) e aquelas encaminhadas ou oriundas de outros processos, tais como o Craqueamento Catalítico em Leito Fluidizado (*Fluid Catalytic Cracking* – FCC) e o Coqueamento Retardado (CR) (PERISSÉ, 2007).

Os gases residuais resultantes do processo como hidrogênio, metano, etano e propano são usados como gás combustível nas refinarias. Parte dos compostos

sulfurados é convertida em H₂S e enviada para unidade de tratamento e conversão, sendo transformada em enxofre elementar (S) ou a ácido sulfúrico (H₂SO₄), enquanto parte dos nitrogenados é convertida em NH₃.

Esses compostos são separados dos derivados ao irem para a fase aquosa do processo, gerando a chamada Água Ácida (AA), ou quando são capturados com aminas, dando origem a gás ácido rico em H₂S (KNUST, 2013; PERISSÉ, 2007).

2.2 Bloco de enxofre

O bloco de enxofre é composto por unidades de controle ambiental, que devem apresentar elevada confiabilidade, visto que a parada em uma de suas unidades pode resultar em diminuição da carga de petróleo processada e, por consequência, redução de lucros (GANDHI; CHUNG; NANGIA, 2010).

A maior parte do petróleo bruto contém quantidades variáveis de enxofre. A URE é a tecnologia mais difundida para reduzir o impacto ambiental, devido aos compostos sulfurados. Nela, o H₂S proveniente do hidrotratamento dos vários destilados do petróleo cru é convertido em enxofre elementar para minimizar a poluição atmosférica (redução das emissões de SO_x).

A carga da URE, rica em H₂S, é também proveniente de outras unidades de conversão além do HDT, tais como, FCC e CR, que geram correntes de Gás Combustível (GC) e Gás Liquefeito de Petróleo (GLP) com alto teor de H₂S, CO₂ e mercaptanas, que são tratadas em unidades de aminas. Tais compostos ácidos são removidos do fluxo de gás pelo contato com uma solução aquosa de dietanolamina (DEA), na etapa de absorção, de modo que as frações de gás combustível e de GLP, após tratamento, possam atender as especificações relacionadas à corrosividade e ao teor de enxofre, agregando qualidade ao produto (PARKASH, 2013).

A etapa de regeneração da solução DEA libera uma corrente gasosa (contendo os compostos ácidos), a qual é enviada para URE e outra corrente líquida (DEA pobre a ser recirculada).

As unidades de conversão também geram correntes de AA, que além de H₂S, possuem NH₃. A corrente líquida é envida para tratamento nas Unidades de Tratamento de Águas Ácidas (UTAAs) que, em geral, possuem duas torres: coluna 1

(torre esgotadora de H₂S), para remoção de grande parte do H₂S da água ácida e; coluna 2 (torre esgotadora de NH₃), para remoção do H₂S residual e da NH₃. O produto de topo da coluna 1 é o gás ácido, rico em H₂S, que é enviado à URE para conversão do H₂S a enxofre elementar (BRITO et al., 2011).

O processo de obtenção do enxofre na URE é subdivido em duas partes: conversão térmica e conversão catalítica. A conversão térmica de H₂S em enxofre é feita em uma caldeira à temperatura de 1200 °C, obtendo-se uma conversão de 70 % de enxofre. O H₂S remanescente (30 %) é convertido em enxofre por conversão catalítica, atingindo a recuperação de 23 % de enxofre. O gás ácido remanescente sofre oxidação a SO₂ no incinerador (SENAI, 2015).

A Figura 1 representa o esquema simplificado (mais comum) do bloco de enxofre (Bastos et al., 2015)



Figura 1 – Diagrama simplificado de refino

Fonte: Adaptado de BASTOS et al., 2015.

Uma opção à URE é a tecnologia de produção de ácido sulfúrico em vez de enxofre, conhecida como SNOX, que depende da demanda de mercado da área onde a refinaria se encontra. Essa Unidade é capaz de remover dióxido de enxofre, óxidos de nitrogênio e particulados dos gases de combustão. O enxofre é recuperado como ácido sulfúrico concentrado e os óxidos de nitrogênio são reduzidos a nitrogênio livre (LAURSEN; KARAVANOV, 2006). Na ausência de uma URE ou outra tecnologia de conversão de compostos sulfurados, uma alternativa é queimar o gás ácido em fornos de refinaria ou em tocha química (GUIMARÃES, 2006; PETROBRAS, 2002; QUINLAN; HATI, 2010).

2.3 Sistema de tocha

Tochas ou *flares* são dispositivos de segurança usados para descarte de gases residuais durante condições normais (queima rotineira) e de emergência (não rotineira não planejada). A queimas não rotineiras também podem ser planejadas, como em caso de operação de manutenção. A diferença entre queima rotineira, não rotineira (planejada e não planejada) é a frequência dos eventos de queima e o risco inerente ao dano ambiental (AER, 2021). Trata-se de um processo de combustão em ambiente aberto em que o ar circundante fornece oxigênio para a chama. Tipicamente, é assumida uma eficiência de destruição de 98 % (Wang; Pereira, Hung, 2004).

A eficiência de destruição é a porcentagem de um componente específico no gás enviado para queima que é convertido em um composto diferente (CO₂, CO ou outro HC intermediário), enquanto a eficiência de combustão é a porcentagem de HC no gás enviado para queima que é completamente convertido em CO₂ e vapor de água. A eficiência de destruição será sempre maior que a eficiência de combustão. Geralmente a eficiência de combustão de 96,5 % corresponde a uma eficiência de destruição de 98 % (U.S. EPA, 2015).

Ao sistema de tocha, são enviados automaticamente alívios gasosos e, às vezes líquidos, a partir das válvulas de alívio de pressão (PSVs) instaladas em equipamentos da planta industrial, quando em sobrepressão. Esses alívios são coletados através de grandes tubulações e direcionados para uma tocha vertical elevada, que pode ser assistida por vapor ou ar, cujo objetivo é evitar a queima com fumaça e resfriar os sistemas internos do queimador. Os gases liberados são queimados na extremidade da tocha por um piloto (sempre aceso) (BAHADORI, 2014a).

O sistema de tocha possui um vaso separador vapor-líquido, conhecido como vaso de "*knock-out*", para remover grande quantidade de líquido que pode vir com os alívios gasosos, capaz de extinguir a chama. Os gases aliviados também podem estar

sujeitos ao evento de *"flashback"* (retorno da chama), caso a vazão aliviada seja muito baixa, sendo esse evento dificultado pela passagem do gás por um selo de água, previsto no projeto da tocha. Além disso, uma pequena quantidade de gás (gás de purga) é continuamente queimada para evitar entrada de ar no sistema (BAHADORI, 2014a).

A Figura 2 exemplifica um sistema de tocha assistida, com seus principais equipamentos.

Figura 2 – Sistema de tocha assistida.



Fonte: Adaptado de BADER; BAUKAL; BUSSMAN, 2011.

A definição do tipo de tocha depende do processo e suas necessidades. A norma API 537 (2017) possui um diagrama de decisão para auxiliar o projetista nessa escolha. Os principais tipos de tocha são (U.S. EPA, 2000):

 Tochas enclausuradas (enclosed flare) – utilizada quando não se deseja mostrar a chama, por exemplo, por motivos ambientais e/ou quando é requerida uma maior eficiência de combustão;

- Tocha enclausurada multiponto no solo (ground flare) igualmente utilizada quando não se deseja mostrar a chama e/ou é necessária uma maior eficiência de combustão dos gases. Apresenta alto custo e problemas de dispersão;
- Tocha comum (utility flare) tocha sem assistência e de baixo custo;
- Tocha assistida por vapor/ar (steam/air assisted flare) melhora a queima de componentes mais pesados na corrente; necessita de vapor de média pressão ou ar (a partir de um soprador ou compressor) para operar, respectivamente;
- Tocha sônica (sonic flare) exige energia de pressão para garantir a performance.

As operações típicas da tocha são basicamente a queima "sem fumaça" e "endotérmica". Para operação sem fumaça, tochas usam fontes de momento externo (geralmente vapor ou ar) para fornecer mistura eficiente de gás-ar e turbulência para completa combustão. A queima sem fumaça é necessária, principalmente para compostos orgânicos mais pesados que o metano.

A queima endotérmica requer energia adicional (injeção de gás de assistência), a fim de garantir a oxidação completa dos gases residuais, tais como para correntes residuais de enxofre e de amônia. Nesses casos, são utilizadas tochas denominadas endotérmicas (assistidas à GC) ou também podem ser chamadas de "químicas" (WANG; WILLIFORD; CHEN, 2004).

De acordo com a norma API 521 (2014), assistência com vapor ou ar não é comumente aplicada em tochas químicas, uma vez que os produtos queimados nestas tochas não geram fumaça e têm baixo Poder Calorífico Inferior (PCI). Neste caso a utilização de vapor/ar poderia apagar a chama.

Em planta de processo em que H₂S livre ou correntes contendo H₂S são enviadas para queima, considerações devem ser feitas, tais como a instalação de uma tubulação específica e uma tocha química para recebimento dessas correntes. Os seguintes pontos devem ser estudados para recebimento de correntes de gás ácido (BAHADORI, 2014b):

- Injeção automática de gás combustível para queima estável;
- Tubulações, ramais e chaminé devem ser traceadas com vapor e isoladas para evitar sublimação de sais de amônio e consequente obstrução das linhas.

2.4 Eficiência da combustão em tochas

No início dos anos 1980, a *United States Environmental Protection Agency* (U.S.EPA) realizou uma série de estudos de desempenho em tochas e concluiu que tochas adequadamente projetadas e operadas alcançam uma boa eficiência de destruição: os experimentos mostraram que a eficiência era alta (pelo menos 98 %), desde que a chama, nas condições de operação, estivesse estável (U.S.EPA, 2012).

Uma chama estável, de acordo com as disposições gerais do 40 CFR § 63.670 de 2018 (Código Regulamentar Federal do Estados Unidos para operação de tochas), deve ter:

- 1. Exceto o previsto no item 2 abaixo, velocidade de saída (U_f) do gás, no bocal, menor que 18,3 m s⁻¹ (60 ft s⁻¹);
- U_f menor que 121,9 m s⁻¹ (400 ft s⁻¹) e inferior a velocidade máxima permitida (U_{max}), de modo a evitar o *lift off* (descolamento) da chama.
- O Poder Calorífico Inferior na Zona de Combustão (PCI_{zc}) deverá ser maior ou igual a 10,63 MJ Nm-3 (@ 20°C e 1 atm).

A U_{max} permitida (ft s⁻¹) é calculada de acordo com a Equação 1. O PCI_f é o Poder Calorífico Inferior do gás antes da combustão em Btu sfc⁻¹, onde 1212 e 850 são constantes.

$$Log_{10}(U_{max}) = \frac{PCI_f + 1212}{850} \tag{1}$$

Quando não há vazão de vapor ou ar de assistência pré-misturado, o PCI_{zc} é igual ao PCI_{f} .

Estudos realizados duas décadas depois (STROSHER, 2000; LEAHEY; PRESTON; STROSHER, 2001) identificaram que alguns fatores, tais como a velocidade de ventos cruzados, a vazão de gás, bem como do teor de líquido proveniente do vaso separador da tocha podem interferir na estabilidade da chama. Considerando tais interferências, a eficiência de combustão em tochas medidas em campo pode variar de 62-82 %.

A seguir, são elencados os principais fatores que afetam a combustão em tochas (U.S.EPA, 2012):

- <u>Vapor ou ar em excesso</u>: ocorre, principalmente, durante os eventos emergências e por ação voluntária do operador para evitar queima com fumaça;
- <u>Ventos cruzados (fortes)</u>: podem afetar as dimensões e forma da chama, fazendo com que a chama seja dominada por zonas de vigília (zonas de baixas pressões) a jusante da tocha, as quais puxam a chama para baixo;
- <u>Flame lift off</u>: espaço entre a extremidade da tocha e a parte inferior da chama, devido à indução excessiva de ar como resultado das velocidades de saída do gás e meios de assistência (quando houver). Este tipo de evento pode fazer com que a chama se extinga completamente (*blowout*). Esses fenômenos serão detalhados adiante na subseção 2.5;
- <u>Adição de HC líquidos ou condensados às correntes de gás</u>: são responsáveis por inibir a eficiência geral da combustão (STROSHER, 1996).

Ainda nos anos 2000, a influência dos aspectos descritos acima, além de considerações sobre diâmetro da tocha, tipo de combustível e teor de diluente no gás foi avaliada, a partir de experimentos em túnel de vento para tochas de gás natural, etano e propano, gerando um modelo de cálculo de eficiência geral da combustão (KOSTIUK; JONHSON; THOMAS, 2004).

Os resultados mostraram que o vento cruzado tem um forte efeito na eficiência de combustão: em ventos fracos ($U_a < 2,0 \text{ m s}^{-1}$), a eficiência é maior que 99,5 %, mas à medida que o U_a aumenta, a eficiência cai drasticamente. Os testes também indicaram que a velocidade de saída do combustível (U_f) tem impacto na eficiência, sendo os de alta velocidade menos susceptível ao vento cruzado. Estes autores observaram que, das ineficiências resultam as emissões de monóxido de carbono ou combustível bruto, sendo retirado da zona de combustão. Em ventos fracos, essas duas fontes de emissão têm a mesma magnitude, mas com o aumento do vento, a fração de gás bruto retirada da zona de combustão aumenta rapidamente e se torna a principal causa da ineficiência.

A retirada "*stripping*" de combustível da zona de combustão representa o gás bruto não oxidado ou parcialmente oxidado. Isso ocorre porque os ventos cruzados causam a deflexão da chama da vertical e podem alterar seu tamanho e forma, fazendo com que a chama seja dominada por zonas de esteira no lado a sotavento da chaminé, que puxam a chama para baixo (U.S. EPA, 2012). Como resultado, o combustível não queimado permanece sob a chama sendo conduzido para o ambiente pelos vórtices de esteira (KOSTIUK; JONHSON; THOMAS, 2004). A Figura 3 ilustra esse fenômeno.

Figura 3 – Tocha dominada por zonas de vigília



Fonte: Adaptado de KERMANI, DEYMI-DASHTEBAYAZ; LAKZIAN, 2021.

Os dados de eficiência coletados por Kostiuk, Jonhson e Thomas (2004) foram então usados para produzir uma relação semiempírica para estimar a eficiência da combustão (**η**) de uma tocha em vento cruzado, conforme a Equação 2.

$$\eta = 1 - \frac{A}{\left(PCI_f^0\right)^3} exp\left(\frac{BU_a}{\left(gU_f D_f\right)^{1/3}}\right)$$
(2)

Onde, D_f é o diâmetro real da tocha, o PCI_f^0 está expresso em base mássica nas condições de referência (@15 °C e 101,325 kPa), **g** é a aceleração da gravidade, **A** e **B** são coeficientes: para gás natural, **A** = 133,3 (MJ/kg)³ e **B** = 0,317; enquanto para propano e etano **A** = 32,06 (MJ/kg)³ e **B** = 0,272.

2.4.1 Influência dos gases inertes na combustão

Os limites de inflamabilidade são valores extremos do teor de combustível na mistura, com os quais ocorre a propagação da chama. O limite de inflamabilidade é classificado em dois tipos: o Limite Superior de Inflamabilidade (**LSI**), acima do qual a mistura é muito rica em combustível para queimar e o Limite Inferior de Inflamabilidade (**LII**), no qual o combustível é muito pobre para queimar (ZHAO, 2011), em ambos os casos não se consegue a propagação da chama.

O **LSI** tem metodologia de cálculo para sua obtenção muito difícil, principalmente na presença de inertes, além disso não é considerado como um parâmetro operacional para indicar combustão adequada em tochas (U.S.EPA, 2012), motivo pelo qual não será detalhado nesse trabalho.

O LII, por outro lado, é uma propriedade química importante quando se considera a combustibilidade de uma mistura de gases e pode ser calculado, inclusive quando a mistura apresenta inertes, sendo influenciado tanto pelo tipo, quanto pela quantidade de componentes químicos presentes no gás (U.S. EPA, 2012).

Molnarne, Mizseym e Schroder (2005) descrevem um método para considerar inertes não nitrogenados no cálculo do **LII** de uma mistura gasosa. Este método é utilizado na Norma ISO 10156 (2017) e está descrito na Equação 3.

$$LII_{f} = \frac{100}{\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{X_{i}}{LII_{i}}\right) - (N_{e,H_{2}O} - 1)(x_{H_{2}O}) - (N_{e,CO_{2}} - 1)(x_{CO_{2}})}$$
(3)

Onde LII_f (% volume) é o LII da mistura gasosa enviada para queima na tocha, **n** é o número de componentes na mistura gasosa, **i** é o componente puro individual na mistura, X_i é a concentração do componente puro individual **i** na mistura gasosa (% volume), LII_i é o LII do componente puro individual **i** (% volume), N_{e,H_20} é o coeficiente de equivalência de nitrogênio para água em relação ao nitrogênio (adimensional), x_{H_20} é concentração de água na mistura gasosa (fração volumétrica), $N_{e,C0_2}$ é o coeficiente de equivalência de nitrogênio para CO₂ em relação ao nitrogênio (adimensional), x_{C0_2} é concentração de CO₂ na mistura gasosa (fração volumétrica).

O LII_i é baseado em dados experimentais, onde todos os inertes, incluindo nitrogênio, são assumidos ter um LII infinito (ZABETAKIS, 1965). Molnarne, Mizseym e Schroder (2005) descrevem os valores possíveis de equivalência de nitrogênio para o gás de combustão específico e combinações inertes, conforme Tabela 1.

Componentes	N _{e,H2} 0	N _{e,CO2}
Metano	1,87	2,23
etano	1,40	1,87
Propano	1,51	1,93
Etileno	1,68	1,84
Propileno	1,36	1,92
Hidrogênio	1,35	1,51
Outros combustíveis	1,50	1,87

Tabela 1 – Valores recomendados de coeficiente de equivalência de nitrogênio para água e dióxido de carbono em relação ao nitrogênio

Fonte: MOLNARNE; MIZSEYM; SCHRODER, (2005).

Os gases inertes reduzem a faixa inflamável das misturas gás-ar (aumentam o **LII** e reduzem o **LSI**), além disso parte do calor da reação de combustão é absorvida pelos gases inertes, resfriando a chama e retardando a propagação da combustão (MOLNARNE; MIZSEYM; SCHRODER, 2005). Os dados sugerem que o **LII** na zona de combustão (para tochas assistidas e não assistidas), para manter uma boa eficiência de combustão, deve ser de 15,3 % em volume ou menor (U.S.EPA, 2012).

Ainda sobre a influência de inertes, é importante mencionar novamente o trabalho de Kostiuk, Jonhson e Thomas (2004), os quais fizeram diluições volumétricas de N₂ e CO₂ em correntes de gás natural e propano, concluindo que o efeito da eficiência da combustão depende da composição de inerte adicionado (a adição de nitrogênio gerou ineficiências maiores que adição de CO₂). Observaram também que densidade de energia abaixo de 15 MJ/m³, resultaram em ineficiências significativas mesmo em velocidades de vento tão baixas quanto 1 m s⁻¹, tornando a chama instável, sugerindo uma densidade mínima de energia correspondente à 20 MJ/m³ para estabilizar a chama.

A importância da densidade de energia fica claro ao se analisar a Equação 2: o PCI_f^0 elevado a terceira potência resulta em alta sensibilidade ao diminuir a densidade de energia da corrente enviada para a queima ao ser diluída com correntes inertes.

2.4.2 Influência de gotículas líquidas na combustão

Existem duas principais fontes de gotículas líquidas para a tocha: a condensação de hidrocarboneto saturado ou vapor de água na corrente enviada para a queima. Esses líquidos resultam quando a corrente esfria das condições do processo para as condições ambientais na tocha. A outra fonte possível é o transporte de gotículas de líquido proveniente do vaso separador gás-líquido (STROSHER, 1996).

Na tocha, pode ocorrer de pequenas gotículas evaporarem antes de atingir a chama, devido à radiação e esses vapores se misturarão parcialmente com o fluxo de gás antes da queima. Algumas gotas maiores evaporarão parcialmente e consequentemente chegarão à chama no estado líquido, outras evaporarão na superfície da chama, enquanto gotículas ainda maiores persistirão na pluma do exausto ou sairão do fluxo de queima (KOSTIUK; JONHSON; THOMAS, 2004).

As gotículas podem ser água ou hidrocarbonetos, sendo as gotículas de HC mais pesadas, tendem a emitir muita fuligem e compostos tóxicos quando evaporam antes de atingir a chama (GLASSMAN, 1977). Por outro, essa evaporação antes de atingir a chama, aumenta a energia de densidade do combustível, que é menos susceptível a ventos cruzados.

Já para os casos de gotas de água, estas extraem energia da chama para evaporar, reduzindo a temperatura dos gases exaustos da combustão. No entanto, caso as gotículas evaporem antes de atingirem a chama, atuam como diluente do gás combustível, reduzindo, portanto, sua densidade de energia (KOSTIUK; JONHSON; THOMAS, 2004), logo também mais susceptível a ventos cruzados.

Os autores do parágrafo anterior fizeram alguns testes com isoctano (representando o condensado), diesel [representando HCs (C₁₂-C₂₅)] e a água destilada representando líquidos que extraem energia na evaporação sem contribuir

como fonte de combustível adicionados ao fluxo da tocha. A conclusão mostra que gotículas de água adicionadas ao fluxo do queimador aumentaram a ineficiência da combustão proporcionalmente à quantidade de água adicionada; gotículas de isoctano e diesel proporcionam ineficiências menores.

Uma vez que a adição de água não promove a produção de fuligem, a Equação 2 permanece válida, visto que não há mudança no balanço de massa do carbono. Para os casos de adição de gotículas de HC mais pesadas, contudo, essa equação se torna inválida.

Arshad (2004) fez um experimento semelhante e observou que o tamanho da gota e a fração mássica de líquido tem efeito modesto na ineficiência de tochas de gás natural de baixa vazão, mas quase nenhum na ineficiência em tochas de alta vazão. Observou também que sem gotículas, a energia química do combustível é convertida em energia térmica, aquecendo os produtos da combustão e aumentando a temperatura da chama. A adição de um líquido não combustível exige que parte da energia química da chama seja transferida para o líquido. Esta transferência de energia aumenta a temperatura do líquido que, sendo água, evapora e extrai ainda mais energia da chama e, como consequência, gera uma chama menos robusta e com menor temperatura. Por isso, as correntes com gotículas de água são mais suscetíveis ao vento cruzado.

2.5 Tipos de chama e suas características

As chamas, em geral, são classificadas de duas formas (TURNS, 2000):

- <u>Chamas difusas</u>: vapores combustíveis e oxidantes estão inicialmente separados e a combustão depende da difusão das espécies químicas na frente de chama (direção normal à interface entre esses reagentes). O combustível e o comburente se difundem em direção a essa interface, enquanto os produtos da combustão se difundem para longe dela. A frente de chama ocorre na região onde a mistura alcança a proporção estequiométrica.
- <u>Chamas pré-misturadas</u>: os vapores combustíveis e oxidantes são misturados antes da ignição. Apresentam menor comprimento de chama quando
comparado às chamas difusas e são localmente mais intensas. Isso ocorre, pois o combustível é consumido rapidamente, visto que o ar já está na mistura. As chamas também podem ser classificadas como tipo jato ou flutuantes, conforme (BRANCO, 2014; SENGUPTA, 2010):

- <u>Chamas difusas do tipo jato</u>: os vapores combustíveis são liberados em forma de jato e o calor produz uma chama turbulenta. Muito ar do entorno entra na chama.
- <u>Chamas difusas flutuantes</u>: vapores são gerados pelo aquecimento do combustível, os quais sobem devido ao empuxo. Como resultado, ar é arrastado do entorno para formar uma mistura combustível-ar.

As chamas ainda podem ser laminares ou turbulentas, a depender do Número de Reynolds (**Re**). Se a velocidade do gás e do comburente forem baixas (**Re** < 2100), a mistura entre o gás, o comburente e os produtos da combustão ocorrerão basicamente por difusão, originando uma chama de difusão laminar. Por outro lado, se pelo menos uma das velocidades for alta (**Re** >= 2100), a mistura ocorrerá devido ao transporte macroscópico de massa, caracterizando um escoamento turbulento, logo, uma chama turbulenta (BRANCO, 2014; SENGUPTA, 2010).

A Figura 4 ilustra o comportamento de uma chama de difusão: dada uma chama formada por um jato livre de gás, liberado por um bocal de diâmetro D_f em um meio em repouso, cuja velocidade perpendicular ao plano do bocal é U_f . Se a U_f for baixa, a base dessa chama fica colada ao bocal. Caso haja aumento da velocidade de saída, a base da chama tenderá a se afastar do bocal, evento chamado *lift off.* Se U_f continuar aumentando, atingirá um valor limite, onde a chama é soprada e se extingue *"blowout".*





Fonte: BRANCO, 2014.

Assim, existe uma faixa de condições (velocidade de descarga do jato e concentração de combustível na mistura), na qual a combustão estável pode ser mantida, limitada pelo *lift off* e pelo *blowout* (BRANCO, 2014).

Em geral, um modelo completo de chama irá incluir informações como forma e dimensão da chama; taxa de calor liberada; fração de calor irradiada; temperatura da chama; emissividade da chama; potência emissiva de superfície e fator de vista (FV - fração da radiação que sai de uma superfície e atinge a outra superfície diretamente).

Contudo, frequentemente ter todas essas informações são desnecessárias. Caso a chama possa ser tratada como uma fonte ponto, ela pode ser caracterizada pela taxa de calor liberada, fração de calor irradiado e um simples FV (WICKSTRÖM, 2016).

2.5.1 Jatos de fogo

Os jatos de fogo ou *jets fire* são liberações de elevado momento da queima de HC ou substâncias combustíveis, seja na forma líquida ou gasosa (CAMERON; RAMAN, 2005). Suas propriedades dependem da composição do combustível, condições de liberação, taxa de liberação, geometria de liberação, direção e condições do vento ambiente.

Contudo, não se pode generalizar que jatos de fogo são apenas de altas velocidades (altos momentos), uma vez que para combustíveis gasosos, as tochas subsônicas são exemplos de jatos de fogo com mais baixo momento, cuja velocidade de saída de gás está na ordem de 50 m s⁻¹ ou menor. Essas chamas são influenciadas pelo vento e pelo empuxo, além da região dominada pelo momento no início da chama. A entrada de ar em baixas velocidades não é eficiente, formando, portanto, chama longas, fuliginosas e radiantes (COWLEY; JOHNSON, 1992).

As ferramentas matemáticas que permitem modelar jatos de fogo, bem como sua radiação, podem ser divididas em três classes de modelos (COWLEY; JOHNSON, 1992):

 <u>Modelos semiempíricos</u>: muito utilizados em análises de consequência com foco principal na radiação em objetos externos e são baseados em correlações ajustadas a dados de experimentos em escala industrial;

- <u>Modelos de campo</u>: modelam todas as interações fluidodinâmica, termodinâmica e química na chama. Eles são baseados em soluções numérica das equações de Navier-Stokes e incorporam submodelos de combustão e transferência de calor;
- Modelos integrais: baseados nos modelos de campo para suposições das propriedades da chama, mas que simplificam o número de dimensões do problema, avaliando, entre outras, leis de arraste para descrever como o ar entra na chama.

Todas as abordagens acima podem fornecer previsões precisas do formato da chama, tamanho da chama e fluxo de radiação externa.

A seguir serão detalhados os modelos semiempíricos para estimativa de radiação em tocha apresentados na API 521 (modelos de radiação) e na subseção 2.6 serão abordados os modelos de campo, ambos focos deste trabalho.

A Figura 5 ilustra os principais métodos de modelagem utilizados para o cálculo da radiação térmica de jatos de fogo, os quais podem ser divididos em três principais abordagens: o modelo de ponto único, de múltiplos pontos e de corpo sólido.

 Ponto único
 Múltiplos pontos
 Corpo sólido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido
 Image: Corpo solido

 Image: Corpo solido
 Image: Corpo s

Figura 5 – Abordagem da modelagem empírica de radiação térmica.

Fonte: WHITE; BUSSMAN, 2012.

No modelo de ponto único é assumido que toda a radiação térmica provém de uma fonte pontual que irradia em todas as direções, localizada no interior da chama, geralmente é considerado o centroide da chama. No modelo de múltiplos pontos, o formato da chama é considerado em comparação ao modelo de ponto único. O usuário pode decidir o número de fontes de radiação térmica pontuais a serem incluídas nos cálculos, conforme nível de precisão desejado.

Outra abordagem é considerar a chama como um objeto sólido e calcular o fluxo radiativo utilizando uma potência emissiva na superfície. Adicionalmente, é assumido que a potência emissiva na superfície é constante em toda a área do objeto sólido. A potência emissiva ponderada da superfície (quantidade de fluxo de radiação que emana da superfície da chama) do modelo é calculada a partir da fração de calor irradiado (**F**) e da área total do objeto idealizado (COWLEY; JOHNSON, 1992).

Atualmente, são bastante difundidos os seguintes modelos de radiação, que também preveem comprimento, trajetória e deslocamento da chama: API 521 (2014), para hidrocarbonetos leves e hidrogênio, cuja abordagem é fonte pontual e Chamberlain (1987), voltado para hidrocarbonetos leves (frequentemente usado de maneira mais ampla), que utiliza a abordagem de corpo sólido.

O modelo de radiação da API 521 destina-se a liberações subsônicas, o que também inclui correlações empíricas para comprimento de chama, inclinação da chama com o vento e fração de calor irradiado. As informações sobre comprimento de chama são limitadas e geralmente são baseadas em observações visuais relacionadas às descargas em condições não rotineiras para sistemas de tocha (MILLER; JUNG; LUTOSTANSKY, 2014).

Este método será detalhado a seguir, uma vez que algumas de suas equações são utilizadas em modelos regulatórios de dispersão de gás (RAHNAMA; DE VISSCHER, 2016).

2.5.2 Dimensões da chama

Esta subseção tem como objetivo apresentar os principais estudos utilizados para a previsão da geometria da chama em jatos, principalmente modelos voltados para tocha industrial.

A maioria do conhecimento sobre tamanho, formato e inclinação da chama em jato de hidrocarbonetos são provenientes de uma combinação de estudos em escala laboratorial de uma variedade de combustível e de medições em grande escala, principalmente de gás natural e propano (COWLEY; JOHNSON, 1992; CAMERON; RAMAN, 2005).

Em relação às chamas verticais, vários estudos sugeriram diferentes maneiras para definir a forma visível de jatos de chama. Baron (1954), a partir de um estudo teórico, identificou que a superfície da chama turbulenta de um jato vertical sem pré mistura, com empuxo desprezível é semelhante a um tipo de elipse vertical.

Estudos experimentais e teóricos sobre chamas subsônicas sugerem uma forma cilíndrica (ODGAARDE, 1983; SONJU; HUSTAD, 1984; BAGSTER; SCHUBACH, 1996); outros estudos apontam para uma figura semelhante ao tronco de um cone (KALGHATGI, 1983; CHAMBERLAIN, 1987) para representar a forma de chamas de difusão turbulenta em ventos cruzados ou tochas sob a influência do vento.

Na década de 70, surgiram os primeiros estudos empíricos sobre o tamanho e a forma da chama (BRZUSTOWSKI 1972, 1976). Durante a década seguinte, Kalghatgi (1983) usou experimentos em túneis de vento para prever a forma e o tamanho das chamas de difusão turbulentas de jatos de HCs em vento cruzado. Leahey e Davies (1984) obtiveram as dimensões das chamas (comprimento, diâmetro e área) a partir de observações de campo em tochas de 32 m de altura para diferentes composições de gás ácido.

Leahey et al. (1985) desenvolveram um modelo para estimar comprimento, formato e área para chamas difusas a partir de testes em tocha de 24 m de altura e 0,1 m de diâmetro. Leahey e Schroeder (1987) mediram o tamanho e orientação de chamas em tochas de 24 m de altura e 0,1 m de diâmetro queimando gás ácido. Nesses estudos aspectos como extensão a favor do vento e volume foram abordados.

Cook et al. (1990) a partir de dados experimentais em tocha industrial obtiveram informações sobre tamanho, forma e radiação de chama de gás natural. Beychok (2005) também fornece equações para obtenção dessas características da chama. Nesse último estudo, o comprimento de chama é descrito como função da liberação de calor do gás de combustão, abordagem que, inclusive, é empregada atualmente nos modelos regulatórios de dispersão de gases (RAHNAMA; DE VISSCHER, 2016).

Leahey, Preston e Strosher (2001) propuseram equações para estimar comprimentos, áreas e volumes da chama como função da velocidade de saída, taxa de mistura estequiométrica e velocidade do vento. O calor liberado como parte do processo de combustão foi então estimado a partir do conhecimento das dimensões da chama, juntamente com uma temperatura de chama assumida de 1200 K. Neste

trabalho, os resultados das previsões teóricas foram comparados com valores de eficiência de combustão obtidos como parte de um estudo observacional.

2.5.2.1 Comprimento de chama

O comprimento de chama (L) é a distância do ponto de liberação até o final definido da chama. Com vento ou em chamas afetadas pelo empuxo, este comprimento pode ser medido curvilineamente ao longo da trajetória da chama ou pode ser a distância em linha reta até a extremidade da chama (COWLEY; JOHNSON, 1992). Muitos autores descobriram que o L depende das reações de combustão, velocidade do vento (incluindo arraste de ar), velocidade do gás/vapor e de suas características, tais como temperatura, quantidade de calor irradiado e geometria. O L é afetado ainda pelas propriedades do combustível (composição, calor específico e poder calorífico) (SENGUPTA et al., 2018).

A API 521 (2014) fornece dois métodos para dimensionamento de tochas, que estimam tanto o comprimento de chama como sua trajetória e deslocamento: o primeiro é uma abordagem mais simplificada e mais comumente utilizada e o segundo é uma abordagem mais específica, baseada no método de Brzustowski e Sommer (1973).

Para o comprimento de chama, o API 521 fornece um gráfico que correlaciona comprimento de chama e calor liberado na queima, que tende a ser confirmado em casos de baixas velocidades de vento e para *design* de tocha comuns "*pipes*", embora os comprimentos sejam superestimados para ventos mais fortes e com *design* especial de queimador (SHORE, 1996).

A Equação 4 apresenta um método para o cálculo do comprimento de chama, levando em conta diferentes tipos de ponteiras (*tips*) da tocha.

$$L = I1 \left[\frac{H_t}{N}\right]^{I2} \tag{4}$$

Onde: L: comprimento da chama, m; H_t : calor bruto liberado, J s⁻¹;

N: número de ponteiras (tips).

As constantes **I1** e **I2** levam em conta diferentes tipos de ponteiras da tocha, conforme apresentado na Tabela 2.

Tabela 2 - Constantes I1 e I2, conforme ponteira da tocha

Тіро	I 1	12
Pipe flare (subsônico)	0,00331	0,4776
Queimador sônico (único)	0,00241	0,4600
Queimador sônico (múltiplo)	0,00129	0,500
Fonte: SONI; PARMA, 2018.		

Palacios, Muñoz e Casal (2009) identificaram o L como uma função da vazão mássica e do diâmetro de saída. Isso já havia sido observado por Kalghatgi (1984), com chamas de jatos subsônicas de hidrocarbonetos e chamas sônicas de jatos de hidrogênio com até 2 m de comprimento.

O método Brzustowski estima o comprimento de chama como parte do procedimento de cálculo. Contudo, não é ideal para ventos fracos, pois leva a comprimentos muito longos para ser um valor prático. Nessa abordagem, o centro da chama é um pouco mais alto e mais próximo da tocha que o método simplificado da API e, como consequência tem níveis de radiação no solo, imediatamente abaixo da tocha, bem maiores (SHORE, 1996).

2.5.2.2 Comprimento visível e químico da chama

O comprimento da chama é uma das propriedades mais importantes da chama não pré-misturada. Contudo, é muito difícil medir o comprimento de chama de forma precisa, principalmente por chamas turbulentas serem "tremulantes" (KIM et al., 2007; WADE; GORE, 1996).

Vários métodos são empregados para definição do comprimento da chama, incluindo determinações visuais por um observador (ou imagens de chama), medição

da temperatura da linha central por termopares ou concentração de espécies por instrumentos analisadores de gás (WADE; GORE, 1996).

O comprimento da chama a partir de análises visuais ou imagens da chama é chamado de "comprimento da chama visível", sendo, em geral, considerado como referência para aqueles obtidos por outros métodos, ou seja, com base em temperaturas ou concentrações de espécies (MEI et al., 2012).

Huang, Savas e Goauhalli (1992) mostraram que a temperatura média da superfície correspondia ao contorno de uma fotografia de longa exposição da chama visível. Esta abordagem apresenta um método alternativo para medir o tamanho e a posição da chama. Como em Fluidodinâmica Computacional (CFD), o L geralmente não é uma saída direta, assumir um valor de temperatura para delinear a porção visível da chama é uma opção viável. Fairweather, Jones e Lindstedt (1992) usaram um valor limite de temperatura de 1200 K para jatos de gás natural em escala de laboratório, para prever a estrutura da chama a partir de CFD. Enquanto Baillie et al. (1998) usaram o valor de 1400 K em uma análise fenomenológica de jatos de gás natural em escala de campo. Tal diferença de 200 K na temperatura axial alterou o comprimento da chama na ordem de 20-25 %.

Os modelos de corpo sólido simplificam a geometria da chama para uma forma geométrica com propriedades térmicas constantes. O melhor ajuste para forma geométrica requer uma medição da geometria real da chama. Uma das abordagens utilizadas em estudos experimentais é determinar os corpos da chama pelos limites visíveis da chama, ou seja, o que pode ser visto por um olho humano ou câmera digital. Caso seja utilizado um termovisor, a geometria é determinada por uma isoterma (contorno da chama onde a temperatura está igual ou acima de uma determinada temperatura). A temperatura a ser definida para o limite externo da isoterma depende da aplicação. A partir de comparações com imagens visuais, estudos de tochas que queimam propano normalmente usam valores de 600 K - 800 K (BALCARRAS, 2020).

A determinação da temperatura não é intuitiva. Mesmo com dados experimentais, a escolha de valores de emissividade e temperatura de tochas na literatura é quase arbitrária. Apesar disso, o modelo de chama sólida é muito usado para validar dados experimentais. Temperatura de 1300 K produzem bons resultados para jatos de fogo verticais de propano (PALACIOS et al., 2012).

Outra metodologia menos subjetiva e mais precisa é baseada em medições de espécies ao longo do eixo da chama, sendo muito utilizada em cenários onde a observação visual do comprimento da chama luminosa não é possível. Nesse caso, a metodologia é denominada de comprimento químico da chama ou altura química da chama tendo sido proposta primeiramente por Hawthorne et al. (1949), definindo-a como "a distância até o ponto de 99% de combustão completa".

Atualmente, o método de Mei et al. (2012) para comprimento de chama química definido pela razão de monóxido de carbono ($R_{CO} = X_{CO} / X_{COmax} = 0,01$), ou seja, 1 % da fração molar máxima de CO, é considerando o mais preciso para essa finalidade, onde X_{CO} é a fração molar de monóxido de carbono.

2.5.2.3 Trajetória e deslocamento da chama

Os modelos que caracterizam a chama pela trajetória da linha central e pelo comprimento curvilíneo da chama incluem automaticamente a distorção da chama nas correlações para a trajetória da chama (COWLEY; JOHNSON, 1992).

Na abordagem simplificada do API 521, a distorção da chama causada pela velocidade do vento é definida em termos do desvio horizontal $\sum \Delta x$ e do desvio vertical $\sum \Delta y$ da extremidade da chama e é uma função da razão entre a velocidade real de saída do gás na tocha (U_f) e a velocidade do vento (U_a). A U_f é obtida conforme Equação 5 (MANNAN, 2012).

$$U_f = \frac{V_f}{\pi D_f^2 / 4} \tag{5}$$

Onde V_f é vazão volumétrica de gás enviado para queima na tocha (m³ s⁻¹).

As coordenadas da extremidade da chama são determinadas usando a Figura 6.

O modelo de Brzustowski e Sommer (1976) leva em consideração a deflexão da chama pelo vento de forma aproximadamente realista. Este modelo combina correlações de fluxo frio medidas para jatos de HCs em fluxos cruzados com a sugestão de que o fim da chama pode ser identificado como o ponto no eixo das concentrações máximas em que o gás de queima é diluído até o LII.





Fonte: STEWART, 2016.

Para o cálculo da concentração no LII (adimensional) do gás enviado para queima na tocha, usa-se a Equação 6.

$$\overline{LII}_f = LII_f (U_f / U_a) (M_f / M_a)$$
(6)

Onde, LII_f é a concentração do LII do gás no ar em fração volumétrica; M_f e M_a são a massa molecular do gás de tocha nas condições de descarga e do ar, respectivamente.

Para o cálculo da coordenada adimensional \overline{S}_L , da concentração \overline{LII}_f no eixo do jato e a partir dela, a coordenada \overline{X}_L (essa coordenada é identificada com a localização da extremidade da chama) a favor do vento, usam-se os itens a seguir (BRZUSTOWSKI, 1976).

i. Se
$$\overline{LII}_f < 0.5$$
: $\overline{S}_L = 2.04 (\overline{LII}_f)^{-1.03}$ e $\overline{X}_L = \overline{S}_L - 1.65$
ii. Se $\overline{LII}_f > 0.5$: $\overline{S}_L = 2.51 (\overline{LII}_f)^{-0.625}$
Se $\overline{S}_L > 2.35 \ \overline{X}_L = \overline{S}_L - 1.65$
Se $\overline{S}_L \le 2.35 \ \overline{S}_L \approx 1.04 \ \overline{X}_L^2 + 2.05 \ \overline{X}_L^{0.28}$

Nesse caso \overline{X}_L como função de \overline{S}_L é mostrado na Figura 7.

Figura 7 – Relação entre \overline{S}_L e \overline{X}_L para \overline{S}_L < 2,35



Fonte: BRZUSTOWSKI, 1976.

A elevação adimensional (\overline{Z}_L) da extremidade da chama acima da extremidade da tocha é calculada como $\overline{Z}_L = 2,05 \,\overline{X}_L^{0,28}$.

A razão (**R**) entre o fluxo de momento do jato (\overline{M}_f) e o fluxo de momento do vento cruzado (\overline{M}_a) deve ser calculada conforme a Equação 7.

$$R = \left(\rho_f / U_f^2\right) (\rho_a / U_a^2) \tag{7}$$

Onde, ρ_s e ρ_s são a massa específica do gás da tocha nas condições de descarga e do ar ambiente, respectivamente.

Também são calculadas as coordenadas dimensionais da extremidade da chama em relação à extremidade da tocha, de acordo com as Equações 8 e 9.

$$Z_L = \bar{Z}_L D_f R^{1/2}$$
(8)

$$X_L = \bar{X}_L D_f R^{1/2} \tag{9}$$

Observe que esse procedimento não deve ser usado para $U_f/U_a > 110$.

2.5.3 Emissividade

A emissividade (calor irradiado) de uma chama depende do tipo de combustível e da natureza da combustão. O calor irradiado é emitido por gases, em particular, dos gases exaustos: CO₂, H₂O, N₂, CO e O₂, e por partículas de carbono (fuligem), da queima de hidrocarbonetos.

O CO₂ e vapor de água irão irradiar seu calor intrínseco, sendo os principais constituintes gasosos para emissividade, emitindo principalmente na região infravermelha (possuem alta capacidade calorífica). O restante da radiação é devido às partículas sólidas, principalmente carbono, as quais dão à chama sua cor visível, visto que a fuligem quente se estende ao espectro visível, sendo responsável por sua luminosidade. Como cada partícula está a uma temperatura relativamente constante, comportam-se como um corpo negro, irradiando quase todo seu calor sensível (MANNAN, 2012; SENGUPTA, 2010). A combustão de hidrogênio, por exemplo, não pode formar fuligem ou CO₂; logo, as emissões térmicas provêm inteiramente do vapor de água (HANKINSON; LOWESMITH, 2012).

Os modelos para determinação de radiação incorporam um valor para emissividade ou fração irradiada do calor total (**F**). Nenhum dos modelos será preciso

ou fornecerá os mesmos resultados para a posição da chama, logo a emissividade pode variar dependendo do modelo empregado.

2.6 Fluidodinâmica computacional

A fluidodinâmica computacional (CFD) é a análise dos sistemas envolvendo o escoamento de fluidos, a transferência de calor e massa e reações químicas, por meio de simulações computacionais. A simulação CFD possibilita a previsão de perfis de concentração, velocidade, temperatura, pressão e propriedades turbulentas de um fluido escoando em determinados espaço e tempo, através de modelos matemáticos diferenciais baseados nas equações de conservação de massa e energia (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

As técnicas de CFD requerem o entendimento do processo (modelagem do problema físico), onde são determinadas as grandezas que atuam sobre o sistema e como o afetam, selecionando os fenômenos físicos e químicos que precisam ser modelados.

Após o fenômeno físico ser entendido, são consideradas hipóteses de forma a gerar o modelo matemático a partir das equações fundamentais da termodinâmica e fluidodinâmica (apresentadas em sua forma derivada geral na Tabela 3) (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2004).

Equações	Forma derivada		
Equação de continuidade	$\frac{\partial \rho}{\delta t} + \nabla(\rho v) = 0$		
Equação de transferência de momento	$\frac{\delta Dv}{Dt} = -\nabla p - [\nabla \tau] + pg$		
Equação de transferência de massa (escalar)	$\frac{\delta C_p DT}{Dt} = -(\nabla q) - \left(\frac{\delta \ln \rho}{\delta \ln T}\right)_p \frac{Dp}{Dt} - (\tau; \nabla v)$		
Equação de transferência de calor (energia)	$\frac{\rho D w_{\alpha}}{D t} = -(\nabla j_{\alpha}) + r_{\alpha}$		

Tabela 3 – Equações de transporte

Esses elementos fornecem descrição física do fluxo do fluido, como a equação de Navier-Stokes e outros fenômenos relacionados, como combustão, radiação e reação em um evento modelado.

As equações da conservação, em geral, não apresentam solução analítica, de modo que a resolução é realizada utilizando-se métodos numéricos: a discretização do domínio implica na substituição das derivadas das equações diferenciais parciais por expressões algébricas, fazendo com que as equações sejam calculadas em cada ponto e as soluções numéricas sejam obtidas. Os principais métodos utilizados são: diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos.

Volumes finitos é o método mais utilizado em simulações de escoamento de fluidos e transferência de calor e massa (PFLUCK, 2010). Este método satisfaz a conservação da propriedade em nível de volumes elementares, através de balanços da propriedade nestes volumes e integração no espaço e no tempo das equações na forma conservativa.

A solução das equações da conservação pelo método dos volumes finitos é realizada através das seguintes etapas: geração da malha, discretização e solução das equações algébricas obtidas (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007).

2.6.1 Malhas computacionais

A geração da malha consiste em dividir o elemento de volume percorrido pelo fluxo em várias subdivisões, chamadas de elementos ou células. Ou seja, a malha computacional define o volume e a forma dos volumes nos quais as equações fenomenológicas serão computadas no sistema onde ocorre o escoamento. Assim, quanto mais refinada a malha, mais precisa será a solução, entretanto, exige maior esforço computacional.

Ao conjunto de células que compõe a malha, com suas inúmeras linhas e pontos de interseção, dá-se o nome de nós. A escolha da malha é um dos fatores primordiais na solução das equações diferenciais. Para problemas com geometria assimétrica e/ou com pontos críticos, é necessário inserir um número maior de pontos nestas regiões (VIANNA Jr. et al., 2014).

As malhas computacionais podem ser de três tipos: estruturadas, não estruturadas e híbridas. Nas malhas estruturadas, os pontos estão distribuídos de maneira regular no espaço do domínio, logo, possuem sempre o mesmo número de nós adjacentes. São compostas por elementos quadriláteros e/ou triangulares, em geometria 2D, e elementos hexaédricos, tetraédricos ou prismáticos, em geometria 3D (GOMES, 2012).

Nas malhas não-estruturadas, não há regularidade na distribuição espacial dos seus pontos e podem assumir diferentes formatos, como triângulos, tetraedros, prismas, hexaedros etc. As malhas híbridas ou mistas são as que contêm dois tipos de malha (GOMES, 2012).

A malha tetraédrica reproduz melhor corpos mais complexos do que as malhas hexaédricas. Por outro lado, as malhas tetraédricas são mais suscetíveis a obter elementos com tamanhos discrepantes, grandes ângulos entre faces e alto grau de vértices (BISWAS; STRAWN, 1998).

De modo geral, as malhas estruturadas são mais aconselháveis para problemas com geometria regulares, enquanto as não estruturadas são indicadas para geometria irregulares e/ou mais complexas, devido a sua maior liberdade de arranjo ou posicionamento dos nós.

A Figura 8 apresenta exemplos de malhas estruturada, não-estruturada e híbrida.

Figura 8 – Tipos de malha computacional: estruturada (a), não estruturada (b) e híbrida (c)



Outro ponto importante na geração de malhas é avaliar sua qualidade, visto que tem influência direta na convergência e nos resultados da simulação. Há diversos

critérios para definição de qualidade de uma malha e para medir a deformação dos seus elementos (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Neste trabalho serão utilizados os critérios de assimetria *(skewness)* e ortogonalidade dos elementos.

Skewness determina a proximidade do ideal (isto é, equilátero ou equiângulo) de uma face de célula ou célula (ANSYS, 2015). Pode ser definido também como a medida relativa à distorção de um elemento em comparação com sua geometria ideal (DOSE, 2013).

A Figura 9 apresenta exemplos de quadriláteros e triângulos ideais e assimétricos.

Figura 9 – Distorção de elementos da malha



Fonte: ANSYS, 2015.

Na sequência, a Tabela 4 mostra as faixas de valores de *skewness* e recomenda que para elementos hexaédricos os valores não ultrapassem 0,85.

Valor do skewness	SS Qualidade da célula	
0 - 0,25	Excelente	
0,25 – 0,50	Muito bom	
0,50 – 0,80	Bom	
0,80 - 0,94	Aceitável	

Tabela 4 – Faixa de valores de skewness e qualidade de malha

Valor do skewness	Qualidade da célula
0,95 – 0,97	Ruim
0,98 – 1,00	Inaceitável

Fonte: ANSYS, 2015.

Valores de *skewness* igual a zero, por definição, indicam uma célula equilateral (melhor qualidade), por outro lado, *skewness* igual a um (01) indicam uma célula degenerada, em que os nós são praticamente coplanares. Células com *skewness* acima de um são consideradas inválidas, visto que as equações de soluções assumem que as células são relativamente equilaterais e equiangulares.

A ortogonalidade dos elementos representa o quão próximos os ângulos entre faces adjacentes dos elementos se aproximam do ângulo ótimo (90° para hexaedros). Os valores da ortogonalidade podem variar entre 0 e 1, com valores mais baixos indicando células de qualidade inferior. Em geral, a ortogonalidade mínima não deve ser inferior 0,01 com o valor médio significativamente maior (ANSYS, 2018).

Por fim, para avaliar se a malha empregada está adequada (superdimensionada ou subdimensionada), é necessário a realização de um teste de independência de malha. Este teste consiste no refinamento gradual do tamanho da malha até que as variáveis de interesse (velocidade, concentração, temperatura, pressão etc.) não mudem mais com o número de elementos (GOMES, 2012).

2.6.2 <u>Turbulência</u>

Em geral, os escoamentos são turbulentos com elevado número de Reynolds. O escoamento laminar é tipicamente ordenado, previsível e determinístico, já o turbulento é sempre tridimensional, não estacionário, randômico e caótico. No escoamento turbulento existem turbilhões que elevam o transporte convectivo de momento, calor e massa (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2004).

O Número de Reynolds (Re) que avalia a transição do escoamento laminar para o turbulento: o escoamento é dito laminar quando Re < 1000 e turbulento quando Re > 3000. Onde ocorre 1000 < Re < 3000, tem-se uma região de transição (ZUCKERMAN; LIOR, 2006).

Ainda que a turbulência seja um problema em aberto, não existe uma teoria definitiva sobre ela. Na tentativa de compreensão da turbulência, Tennekes e Lumley (1972) indicam as seguintes propriedades:

- Irregularidade: aleatoriedade, não há tratamento determinístico;
- Difusividade: a difusividade turbulenta é que causa mistura;
- Número de Reynolds alto;
- Rotacionalidade e 3D;
- Dissipação: os fluxos turbulentos são sempre dissipativos;
- Continuidade: está na escala do contínuo, acima da escala molecular.

Os modelos de turbulência podem considerar as correlações, os métodos integrais, as médias de Reynolds *Navier-Stokes (RANS - Reynolds Average Navier-Stokes)*, a simulação de grandes escalas (LES – *Large Eddy Simulation*) e a simulação numérica direta (*DNS - Direct Numerical Simulation*) (VIANNA Jr. et al., 2014).

2.7 Modelagem da combustão em tochas

Primeiramente, para modelar qualquer problema que envolve fluxos que reagem é necessário englobar o conjunto de equações de transporte que regem massa, espécie, momento e energia. A solução direta dessas equações de transporte para tochas em escala industrial, contudo, é muito difícil: as chamas de tochas são turbulentas e extremamente reativas, impossibilitando a simulação numérica direta, devido à grande variedade de escalas de tempo e comprimento (CASTIÑEIRA; EDGAR, 2008a).

Outro ponto é que os mecanismos químicos realistas para combustão de HCs não podem ser descritos por apenas uma equação de reação. Tais modelos podem incluir dezenas de espécies e centenas de reações que não são conhecidas em detalhes. Portanto, alguma simplificação química deve ser feita (CASTIÑEIRA; EDGAR, 2008a).

Em geral, a modelagem de turbulência é realizada pela simulação DNS (*Direct Numerical Simulation*) ou RANS em tochas. Na primeira abordagem, todas as escalas

de turbulência são tratadas numericamente pelas equações de Navier-Stokes. No entanto, esta técnica tem elevado custo computacional e se mostra impraticável para tochas industriais. A abordagem RANS, por outro lado, utiliza equações de continuidade e Navier-Stokes filtradas, para escoamento incompressível, com foco para a análise dos efeitos de turbulência das propriedades do escoamento médio, sendo utilizada para simplificar a modelagem de sub malha (WILCOX, 2006). Os modelos RANS são aplicados com sucesso devido à sua simplicidade e descrição geralmente correta do comportamento do fluxo.

Singh et al. (2012), a partir de dados de eficiência de queima em testes de campo (escala industrial) da Comissão de Qualidade Ambiental do Texas, conduzidos na instalação de pesquisa e desenvolvimento da John Zink em Tulsa, OK, validaram simulação CFD de tocha em condição rotineira (baixas velocidades de saída de gases) e baixo PCI, utilizando as equações mais populares de Navier-Stokes (RANS), com média de Reynolds para simular a turbulência. Singh et al. (2014) também utilizaram a abordagem RANS na avaliação da capacidade de mecanismos de reação em modelagem de tochas em escala industrial. Nesse estudo, tochas industriais com diâmetros variando de 24" a 36" foram testadas.

Atualmente, a maioria dos estudos numéricos publicados sobre combustão em tochas empregam abordagens baseadas em RANS para prever a turbulência. Contudo, tochas têm sido difíceis de simular com esta abordagem: a mistura em larga escala devido a estruturas coerentes (vorticiais) nas chamas de tochas não é facilmente reduzida para cálculos de CFD no estado estacionário com RANS (SMITH et al. 2011).

Para tochas dominadas por zonas de vigília, onde a chama é severamente curvada pelo vento cruzado (*downwash flame*) e apresenta altas intensidades de turbulência no campo próximo, há poucos estudos numéricos publicados. A Figura 10 ilustra esse fenômeno.

A simulação do "*downwash flame*" é complicada pelas interações aerodinâmicas do fluxo de ar transversal, tubo do queimador e combustível desviado (CASTIÑEIRA; EDGAR, 2008b). Modelos mais sofisticados como o LES podem resolver os detalhes finos do fluxo, diferentemente do modelo de turbulencia K – ε .

O LES fornece uma técnica numérica que resolve grandes escalas de comprimento e tempo enquanto usa modelos para escalas menores e mais

homogêneas. Ao usar LES, a dinâmica da combustão captura o "*puff*" criado pela flutuabilidade na simulação de tocha industrial (SMITH et al., 2011).



Figura 10 – Tocha dominada por zonas de vigília

Embora o modelo LES seja bastante útil para imitar processos de queima ao ar livre, devido ao seu alto custo computacional, não é comumente usado para modelar processos de combustão complexos que envolvem inúmeras de reações (SINGH et al., 2014). Por esse motivo, neste trabalho, o modelo RANS foi preferido sobre o modelo LES.

2.7.1 Equações de governo

As equações de governo básicas a serem resolvidas para a modelagem de combustão RANS são a massa, momento (turbulência), energia e espécies químicas.

As equações de conservação de momento e de continuidade são apresentadas na Equação 10.

$$\frac{\partial u_i u_j}{\partial u_j} = g_1 - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (v) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}; \frac{\partial u_j}{\partial x_j}$$
(10)

Fonte: Adaptado de SHANG et al. (2017).

Onde ρ é a massa específica do fluido, p é a pressão local e u_i representa o valor da velocidade instantânea, que é a soma da velocidade média (\overline{u}) e velocidade flutuante (u'), (REZENDE, 2009) conforme mostrado na Equação 11.

$$u_i = \overline{u_l} + u' \tag{11}$$

A equação do momento médio do conjunto é como na Equação 12.

$$\frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} = g_1 - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(v \frac{\partial \overline{u_l}}{\partial x_j} - \overline{u_l' u_j'} \right); \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_j} = 0$$
⁽¹²⁾

Onde o termo $\overline{u'_l u'_l}$ é o tensor de Reynolds.

Os tensores de Reynolds são termos extras resultantes da decomposição de variáveis turbulentas da solução nos componentes médios e flutuantes.

A hipótese de Boussinesq (Equação 13) é uma abordagem comumente usada para relacionar as tensões de Reynolds com os gradientes médios de velocidade, conforme segue:

$$-\overline{u_i'u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}k\delta_{ij}; \ k = \frac{1}{2}\overline{u_i'u_j'}$$
(13)

Esta hipótese reduz o custo computacional associado à resolução da viscosidade turbulenta (μ_t). Há diversos modelos de turbulência para encontrar o μ_t , porém, neste trabalho utilizaremos os modelos k- ω , mais especificadamente, o SST k- ω .

2.7.2 <u>Modelo de turbulência SST k – ω (Shear-Stress Transport k- ω)</u>

O modelo SST k- ω (*Shear-Stress Transport* k- ω) é muito utilizado em casos com separação de camada limite, por combinação dos modelos de turbulência k- ϵ e k- ω . Destaca-se os resultados do modelo k- ω sobre resultados do modelo k- ϵ em regiões próximas a parede. Contudo, o modelo k- ω exige uma condição de contorno

não nula para ω em correntes livres não turbulentas, não requerida para o modelo k- ϵ (CAZALBOU; SPALART; BRADSHAW, 1993; MENTER, 1994). O modelo SST k- ω , portanto, configura-se com uma combinação ótima entre o modelo k- ω em regiões próximas a parede independente da corrente livre e o modelo k- ϵ para regiões distantes da camada limite.

O modelo k-ω mais utilizado é o modelo de Wilcox (1988), um modelo k-ω padrão com as equações de conservação abaixo:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \frac{\left(\partial \bar{u}_{j}\kappa\right)}{\partial x_{j}} = \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left[\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\kappa}}\right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_{j}} \right] + P_{\kappa} + Y_{\kappa}$$
(14)

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \bar{u}_j \omega\right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega}\right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega + Y_\omega$$
(15)

Onde os termos $P_{\kappa} \in Y_{\kappa}$ representam os termos de produção e destruição de energia cinética turbulenta **k**, respectivamente e os termos $G_{\omega} \in Y_{\omega}$ são os termos de produção e destruição da taxa específica de dissipação da energia cinética turbulenta ω , respectivamente e a viscosidade turbulenta é dada na Equação 16.

$$\mu_t = a^* \frac{\kappa}{\omega}; \ a^* = 1 \tag{16}$$

Onde a* é o coeficiente de amortecimento da viscosidade turbulenta.

No modelo SST k- ω , o modelo padrão k- ω e o modelo k- ε modificado são multiplicados por uma função de mistura (**F**₁) e somados. A **F**₁ é um valor único na região interna da camada limite turbulenta (modelo padrão k- ε) e é zero na região distante da camada limite turbulenta (modelo padrão k- ω) (REZENDE, 2009). A função de mistura está descrita nas Equações 17 e 18.

$$F_1 = tangh(arg_1^4) \tag{17}$$

$$arg_1^4 = min\left[max\left(\frac{\sqrt{\kappa}}{\beta^*\omega d};\frac{500\nu}{d^2\omega}\right);\frac{4\sigma_{\omega^2\kappa}}{cD_{\kappa\omega d^2}}\right]$$
(18)

Onde $CD_{\kappa\omega}$ é a parte positiva da difusão cruzada e **d** é a distância até a superfície mais próxima. O $CD_{\kappa\omega}$ é conforme Equação 19.

$$CD_{\kappa\omega} = max \left(2\rho\sigma_D \frac{1}{\omega} \frac{\partial\kappa}{\partial x_j} \frac{\partial\omega}{\partial x_j}; \ 10^{-10} \right)$$
(19)

As equações 20 e 21 descrevem a viscosidade turbulenta

$$\mu_t = \frac{a_{1\omega}}{\max(a_1\omega; SF_2)} \tag{20}$$

$$F_2 = tangh(arg_2^2); arg_2 = \max\left(\frac{2\sqrt{\kappa}}{\beta^*\omega d}; \frac{500\nu}{d^2\omega}\right)$$
(21)

O termo *S* faz referência ao modulo do tensor médio de deformação \overline{S}_{lj} , e F_2 representa a função de mistura para a viscosidade turbulenta do modelo SST k- ω e σ_D é uma constante empírica.

A energia cinética turbulenta k e a taxa de dissipação específica ω pode ser obtida pela solução de suas equações de conservação, em que as configurações para a constante ϕ , para o modelo SST k- ω , são obtidas utilizando uma função de mistura entre as constantes ϕ_1 (proveniente do modelo k- ω padrão) e ϕ_2 (proveniente do modelo k- ε padrão), sendo a relação entre ambas dada pela Equação 22.

$$\phi = F_1 \phi_1 + (1 - F_1) \phi_2 \tag{22}$$

No modelo SST k-ω são utilizadas as constates apresentadas na Tabela 5.

Constante	ϕ_1	ϕ_2	
β	0,0750	0,0828	
β^*	0,09	0,09	
σ_{κ}	0,5	1,0	
σ_{ω}	0,5	0,856	
σ_D	0,856	0,856	
a	5/9	0,44	

Tabela 5 - Constantes do modelo SST k-ω

Fonte: FIUZA; REZENDE (2020).

2.7.3 Modelos de combustão aplicáveis

Além dos modelos de turbulência e de reações químicas, as interações entre a dinâmica turbulenta dos fluidos e a cinética química devem ser consideradas nos sistemas de tocha. Esses modelos ainda consomem muito esforço computacional, logo, há a necessidade de mecanismos reduzidos para tornar a modelagem numérica prática para aplicações de combustão turbulenta (SINGH et al., 2014).

A seguir, são apresentados de forma resumida, os modelos especialmente adequados para simulação da combustão em tochas:

2.7.3.1 Non-premixed model (mixture fraction + PDF)

Os dois modelos de combustão amplamente aplicados na modelagem de combustão de chama de difusão turbulenta são: a equação de transporte da função densidade de probabilidade (PDF) e a abordagem *flamelet* (CHEN; KOLLMANN, 1992).

Aplicando a abordagem *flamelet*, as equações de transporte para os momentos de uma variável conservada são resolvidas. A variável conservada é escolhida de modo que descreva a mistura local e, portanto, é chamada de fração de mistura. (PITSCH; CHEN; PETERS, 1998).

A fração da mistura pode estar diretamente relacionada à fração de massa da espécie, densidade da mistura e temperatura da mistura. A interação de turbulência e química é explicada com uma função de densidade de probabilidade. Esse modelo também realiza cálculos de equilíbrio, pois é assumida uma química infinitamente rápida (CASTIÑEIRA, 2006).

Além do PDF, o único requisito do modelo é que exista localmente uma relação única entre a fração de mistura e todas as grandezas escalares como as frações de massa das espécies e a entalpia. Uma transformação de coordenadas universal das equações governantes usando a fração de mistura como uma coordenada dependente produz a relação necessária entre as concentrações de espécies e a fração de mistura em termos das chamadas equações de *flamelet* (PITSCH; PETERS; 1998), que são sob algumas suposições simplificadoras do seguinte tipo:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \frac{\chi}{2} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{1}{C_p} \frac{\partial C_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z}\right) + \frac{1}{C_p} \left(\sum_{K=1}^N h_k \dot{m}_k + \dot{q}_R^{\prime\prime\prime} - H\right) = 0$$
(23)

Onde t é o tempo, Z é a fração da mistura, T é a temperatura, χ é a taxa de dissipação escalar, ρ é a massa específica, C_p é o calor específico a pressão constante e $\dot{q}_R^{\prime\prime\prime}$ é a taxa de perda de calor radiativo por unidade de volume. N e h_k são o número de espécies químicas e a entalpia da espécie k, respectivamente. H é responsável pelo fluxo de entalpia por difusão de massa.

O modelo *flamelet* oferece a vantagem de incluir tanto a química de taxa finita quanto a influência dos gradientes da fração da mistura local impostos pelo campo de fluxo. Estes são expressos pela taxa de dissipação escalar, que aparece como parâmetro nas equações de *flamelet* e devem ser modeladas (PITSCH; CHEN; PETERS, 1998).

2.7.3.2 Laminar Flamelet Model (LFM)

A chama turbulenta é definida como um conjunto de elementos de chama laminar (*flamelets*) embutidos em um fluxo turbulento e interagindo com ele (ECHEKKI; MASTORAKOS, 2011). Tem como vantagem incluir tanto a química de taxa finita e a influência do gradiente fração de mistura local imposta pelo campo de fluxo. A fração da mistura permite desacoplar o transporte turbulento e a estrutura da chama (PITSCH; CHEN; PETERS, 1998).

A taxa de dissipação escalar, que aparece nas equações do *flamelet*, controla os fluxos de reagentes para a zona de reação e está relacionada aos gradientes de velocidade do fluxo, devendo ser modelada. Funções de densidade de probabilidade ou densidade superficial da chama são usadas para descrever a chama turbulenta e

relacionar a descrição do *flamelet* à frente da chama turbulenta (ECHEKKI; MASTORAKOS, 2011).

2.7.3.3 Eddy Dissipation model (EDM)

Assume que o combustível e o oxidante são transportados por redemoinhos separados em chamas de difusão. Além disso, as reações químicas são rápidas, com a taxa geral de reação controlada pela mistura turbulenta, de modo que o combustível e o oxidante reagem assim que se misturam em escala molecular.

Para os casos de chamas não pré-misturadas, a turbulência promove convecção lenta e mistura os combustíveis e o oxidante nas zonas de reação, onde eles queimam muito rapidamente. Assumindo esse limite rápido da química no EDM, a taxa média de reação é controlada principalmente por um tempo de mistura turbulento.

Desde que haja turbulência, haverá combustão com as reações ocorrendo na mesma taxa turbulenta, que é usada apenas para reações globais de uma ou duas etapas. Logo, a limitação do modelo é que as espécies cineticamente controladas como radicais não podem ser previstas e as espécies intermediárias são desprezadas.

O modelo também é conhecido como "*mixed-is-burned*", referindo-se a queima imediata (química rápida) quando o combustível e o oxidante são considerados misturados (HOSTE et al, 2019; REIS et. al, 2014).

2.7.3.4 Eddy Dissipation Concept model (EDC)

É um modelo de combustão mais avançado que pode teoricamente ser aplicado para modelar efeitos de taxa finita (CASTIÑEIRA, 2006). Tal modelo admite que as reações na chama estão ocorrendo em escalas finas (pequenas estruturas turbulentas). Presume-se que a combustão nas pequenas estruturas turbulentas esteja ocorrendo em um reator de pressão constante. As condições de entrada deste reator são consideradas as espécies atuais e a temperatura na célula. Em geral, as reações que ocorrem na chama são governadas pelas taxas de Arrhenius. Essas taxas de reação são então integradas numericamente usando o algoritmo ISAT (tabulação adaptativa *in situ*), o qual reduz o tempo computacional para resolver a cinética detalhada da reação (SINGH et al., 2014).

O modelo EDC pode incorporar mecanismos químicos detalhados em fluxos de reação turbulentos. No entanto, requer mais trabalho computacional do que a fração de mistura e os modelos *flamelat* laminares (CASTIÑEIRA, 2006).

2.7.3.5 Composition PDF transport model

O modelo de transporte de composição PFD, assim como o modelo EDC, deve ser usado quando o objetivo for simular efeitos cinéticos químicos de taxa finita em fluxos de reação turbulentos. Com um mecanismo químico apropriado, podem ser previstas espécies cineticamente controladas, como CO e NO_x, bem como extinção e ignição. As simulações de transporte em PDF são computacionalmente custosas e é recomendável iniciar a modelagem com pequenas grades e, de preferência em 2D (FLUENT, 2005).

Castiñeira e Edgar (2008a) usaram o modelo função probabilidade de densidade (*PDF - Probability Density Function*) para simular tochas em uma instalação de túnel de vento (pequena escala). Os resultados da simulação foram validados com perfis de temperatura e concentração das principais espécies.

Esses mesmos autores estudaram um conjunto de experimentos com túneis de vento no CANMET Energy Technology Centre, Ottawa, para simulação de tochas de maior escala, cujos diâmetros, em alguns casos, assemelham-se aos de tochas industriais. Para tal, utilizaram o modelo de combustão *"flamelet"* (*FMC - Flamelet Combustion Model*) e definiram uma fina camada limite para simular o *"flame downwash"*. Os flamelets laminares foram então incorporados em uma chama turbulenta usando métodos estatísticos em PDF. O FMC mostrou-se preciso o suficiente para capturar os detalhes mais importantes da chama.

Tyliszczak (2013) usou um modelo LES de estado instável com o modelo de química de turbulência em PDF juntamente com o mecanismo de reação GRI 2.11 para simular chamas de metano em escala de laboratório. Vujanovic, Duic e Tatschl (2009) utilizaram um mecanismo de reação reduzido acoplado ao FMC em estado estacionário. Em todos esses estudos, a precisão da modelagem foi limitada pelos modelos PDF / *Flamelet*, que previram reações mais lentas.

Para Singh et al. (2012), a abordagem FMC é adequada para sistemas de combustão com química muito rápida, uma vez que não captura fenômenos de ignição, extinção e química lenta. Essa abordagem é apropriada apenas em altas temperaturas (2100 a 2400 K) e, portanto, não é adequada para o casos de gases com baixo PCI e com elevada quantidade de vapor, onde as temperaturas modeladas estão na faixa de 1600 a 1950 K.

O presente trabalho não trata da previsão de radicais na reação e o problema a ser modelado é claramente um caso de queima rápida de chama de alta temperatura, portanto o mixture fraction + PDF é um modelo adequado para ser utilizado, evitando o uso de mecanismos químicos multi-etapas baseados em taxas de Arrhenius, que podem ser diferentes para cada reação.

2.7.4 Modelos de radiação térmica

Nesta subseção objetiva-se apresentar a equação de transferência radiativa (ETR), que descreve como a radiação térmica é transportada dentro de um meio participante.

A ETR em um meio com absorção, emissão e espalhamento da radiação na posição \vec{r} e na direção \vec{s} , é escrita conforme a Equação 24.

$$\frac{dI(\vec{r},\vec{s})}{ds} + (a_{bs} + \sigma_s)I(\vec{r},\vec{s}) = a_{bs}n^2 \frac{\sigma SBT^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{0}^{4\pi} I(\vec{r},\vec{s}') \phi(\vec{s},\vec{s}')d\Omega'$$
(24)

Onde **s**' é o vetor na direção do espalhamento; **s** é o comprimento do percurso; a_{bs} é o coeficiente de absorção; **n** é o índice de refração; σ_s é o coeficiente de espalhamento (constante de Stefan-Boltzmann = 5,669 x 10⁻⁸ W m⁻² K⁻⁴); **l** é a intensidade de radiação, que depende de \vec{r} e \vec{s} ; **T** é a temperatura local; **Φ** é a função de fase do espalhamento e **Ω**' é o ângulo do sólido (ANSYS, 2015). O modelo numérico de radiação é o meio pelo qual a ETR e sua condição de contorno é solucionada. Neste trabalho será utilizado o Modelo de Radiação das Ordenadas Discretas (OD), o qual é melhor descrito abaixo.

2.7.4.1 Modelo de Radiação das Ordenadas Discretas (OD)

Segundo Bidi et al. (2008), o método OD é a melhor escolha para solução de ETR para simular radiação em processos de combustão, visto que é possível considerar os efeitos da radiação não cinzenta e os efeitos do espalhamento.

O método das ordenadas discretas resolve a ETR para um número finito de ângulos sólidos, cada um associado a uma direção vetorial \vec{s} num sistema cartesiano (x, y, z). O nível de discretização angular é controlado pelo usuário (ANSYS, 2015).

No modelo OD, a Equação 24 é transformada numa equação de transporte para a intensidade de radiação nas coordenadas espaciais. Dessa forma, a Equação 25 é reescrita.

$$\nabla (I(\vec{r},\vec{s})\vec{s}) + (a_{bs} + \sigma_s) I(\vec{r},\vec{s}) = a_{bs}n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{0}^{4\pi} I(\vec{r},\vec{s}') \phi(\vec{s},\vec{s}') d\mathbf{\Omega}'$$
(25)

Conforme acima mencionado, o OD também modela radiação de gases não cinzentos. Nesse caso, a Equação 24 é escrita na forma da Equação 26.

$$\nabla \cdot (I(\vec{r},\vec{s})\vec{s}) + (a_{\lambda} + \sigma_{s}) I_{\lambda}(\vec{r},\vec{s}) = a\lambda n^{2} I_{b\lambda} \frac{\sigma_{s}}{4\pi} \int_{0}^{4\pi} I_{\lambda}(\vec{r},\vec{s}') \phi(\vec{s},\vec{s}') d\boldsymbol{\Omega}'$$
(26)

Sendo λ o comprimento de onda; **a** λ o coeficiente de absorção espectral e **I**_{b λ} a intensidade do corpo negro dada pela função de Planck.

O modelo numérico de radiação é como a equação de transferência radiativa e sua condição de contorno são resolvidas. Neste trabalho, o Modelo de Radiação Ordenada Discreta (OD) foi usado em combinação com o modelo de combustão para estimar a radiação de calor do jato. Ele aborda as incertezas dos coeficientes de absorção e espalhamento e considera os efeitos da radiação não cinzenta (BIDI et al. 2008). No entanto, tem um alto custo operacional, mas melhora os resultados da simulação (SINGH et al. 2014).

No modelo espectral para a contribuição da radiação nos meios participantes WSGG (*Weighted Sum of Gray Gases*), todo o espectro é representado por algumas bandas com coeficientes de absorção uniformes, onde cada banda corresponde a um gás cinza (CENTENO et al. 2013). Os coeficientes de absorção e o fator de emissão de corpo negro de cada gás cinza são determinados ajustando os dados de emissão total calculados para espécies puras ou misturas gasosas com uma razão constante entre as concentrações molares dos componentes (CENTENO et al. 2013).

2.8 Modelos de dispersão atmosférica

A emissão de poluentes na atmosfera sob a forma de gases, aerossóis ou partículas faz com que um processo de mistura de gases ocorra. A mistura, o transporte, a propagação e o espalhamento dessas liberações são conhecidos como dispersão atmosférica, a qual é obtida por modelos computacionais que resolvem equações diferenciais por métodos numéricos e algoritmos que simulam seu comportamento (SCHNELLE; DEY, 1999).

Existem vários modelos descritos na literatura, desde os modelos conceituais e computacionalmente simplificados de plumas gaussianas até modelos muito exigentes, baseados em Fluidodinâmica Computacional (CFD). A escolha depende dos cenários e complexidades (Hutchinson; Oh; Chen, 2017). Em geral, a precisão do modelo aumenta à medida que incorpora mais fundamentos, variáveis e equações e, portanto, é mais intensivo em termos computacionais.

Na prática, a maior acurácia será obtida quando o modelo escolhido for mais adequado às necessidades e recursos do modelador. Na maioria dos casos, os modelos mais viáveis são modelos de plumas gaussianas e modelos de "*puff*" gaussianos (Visscher, 2013).

Os modelos de dispersão têm duas classes principais: euleriana e lagrangeana. O primeiro descreve o movimento do fluido relacionado a um sistema de referência fixo no espaço, sendo mais adaptado à dispersão de poluentes sobre topografia complexa ou a difusão de poluentes reativos. Eles se baseiam na resolução numérica sobre uma grade espaço temporal fixa da equação da conservação de massa de uma espécie química poluente. Já os modelos lagrangeanos, utilizam um sistema de referência que segue o movimento da atmosfera, tendo como seu principal expoente o modelo gaussiano (RILEY; HOBSON; BENCE, 2006). Atualmente, todos os modelos que acompanham a nuvem de poluentes em elementos discretos, como segmento "puff" ou partículas fictícias são considerados nessa classe (MOREIRA; TIRABASSI, 2004).

Os modelos gaussianos tentam representar situações reais através de parâmetros empíricos, conhecidos como "sigmas". Podem ser estacionários (independentes do tempo) e denominados "modelos pluma" e os que dependem do tempo, conhecidos como modelos "puff" (Moreira; Tirabassi, 2004).

Esses modelos partem da definição de um eixo de coordenadas que descrevem as concentrações dos poluentes no espaço. O eixo x, coincide com a direção de trajetória da pluma (direção do vento), o eixo y corresponde a horizontal perpendicular a x e o eixo z, corresponde à vertical, conforme Figura 11.

Figura 11 – Modelo de pluma gaussiana



Fonte: Adaptado de TURNER, 1994.

Na Figura 11, h_s é a altura real da fonte, H_s é altura efetiva de liberação de gases na chaminé, que corresponde à h_s mais a ascensão da pluma (Δh).

Admite-se que tanto no plano horizontal quanto no plano vertical, a concentração dos poluentes pode ser expressa por uma distribuição normal ou gaussiana (curva similar à Curva Normal usada em estatística), a qual descreve a pluma e calcula sua concentração na direção do vento, a partir de uma fonte, assumindo condições de estado estacionário (por hora) (ARYA, 1999; MEDEIROS, 2003).

De acordo com Medeiros (2003), a distribuição normal é caracterizada por ter a máxima concentração de poluentes na sua linha central e diminuir exponencialmente até as bordas. A borda de uma pluma apresenta concentrações em cerca de 10 % do valor central e o desvio padrão (σ) mede a dispersão da concentração do poluente em torno da média (μ).

Os modelos gaussianos de plumas são eficazes para distâncias inferiores a 50 km da fonte de emissão, devido à extrapolação de coeficientes de dispersão (ARYA, 1999). Os coeficientes de dispersão são o desvio padrão da função de distribuição gaussiana responsável pela distribuição da pluma no eixo vertical e horizontal (z e y).

A Equação 27 apresenta o cálculo da concentração de poluentes no modelo de pluma gaussiana (TURNER, 1994).

$$C_{(x,y,z)} = \frac{Q}{2\pi U_a \sigma_y \sigma_z} exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \left\{ exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z-H_s}{\sigma_z}\right)^2\right] + exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z+H_s}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\}$$
(27)

Onde:

C: concentração do poluente numa dada posição (g m⁻³);

(x, y): coordenadas cartesianas que identificam o ponto analisado (m);

z: altura média do ponto analisado, acima do nível do mar (m);

 H_s : altura da linha central da pluma ou altura efetiva da fonte (m), acima do nível do solo;

Q: taxa mássica de emissão (g s⁻¹);

 U_a : velocidade média do vento na altura **H** (m s⁻¹);

 σ_y : parâmetro de dispersão na direção horizontal (lateral) da concentração da pluma (depende da distância da fonte e direção do vento) (m);

 σ_z : parâmetro de dispersão na direção vertical da concentração da pluma (depende da distância da fonte e direção do vento) (m).

Quando a pluma atinge a superfície (ou seja, o solo ou a superfície da água), o poluente geralmente não é absorvido ou apenas muito lentamente. Isso é incorporado no modelo ao assumir que a pluma reflete na superfície. Então, uma fonte imaginária é definida no subsolo para que a pluma se comporte como se ela refletisse na superfície, (ver Figura 12). Nesta situação, o último termo da Equação 27 é alterado conforme a Equação 28.

$$C_{(x,y,z)} = \frac{Q}{2\pi U_a \sigma_y \sigma_z} exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \left\{ exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z-H_s}{\sigma_z}\right)^2\right] + \alpha exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z+H_s}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\}$$
(28)

Onde α é o coeficiente de reflexão no solo, assumindo-se α = 1 para uma reflexão total.





Os parâmetros **y** e **z** dependem da distância da fonte emissora ao ponto analisado, da rugosidade aerodinâmica da superfície e da estabilidade atmosférica.

A estabilidade atmosférica é um importante parâmetro para a dispersão de poluentes e pode ser adequadamente indicada pelo número de Richardson (**R**_i). Esse índice representa a relação entre a turbulência mecânica (causada pelo gradiente da

velocidade do vento em relação à altura acima do solo) e a turbulência térmica ou convectiva da atmosfera (causada pelo gradiente de temperatura do ar em relação à altura acima do solo) (STULL, 2000). Porém, não é um parâmetro rotineiramente medido, exigindo técnicas e equipamentos sofisticados.

Reconhecendo a necessidade de um meio prático para definir a estabilidade atmosférica baseada em observações de rotina, Pasquill (1961) introduziu o conceito de classes de estabilidade, que provaram ser muito úteis nos cálculos de dispersão atmosférica que utilizam o modelo de pluma gaussiana. No cálculo de concentração, a aproximação gaussiana incorpora parâmetros de dispersão associados a classes de estabilidade, definidas a partir da estratégia de Pasquill (PASQUILL, 1962), como no modelo *Industrial Source Complex* (ISC).

A estabilidade atmosférica irá descrever a turbulência na atmosfera e depende da velocidade do vento, hora do dia e outras condições, como mostrado na Tabela 6.

Velocidade do vento (m/s)	Período diurno Irradiância solar (W/m²)		Período noturno Cobertura de nuvens (oitavas)			
	Alta (>600)	Moderada (300 – 600)	Leve (<300)	0 - 3	4 - 7	8
≤ 2,0	А	A-B	В	G-F	F	D
2,0 - 3,0	A-B	В	С	F	Е	D
3,0-5,0	В	B-C	С	Е	D	D
5,0-6,0	С	C-D	D	D	D	D
> 6,0	С	D	D	D	D	D

Tabela 6 – Correlação da classe de estabilidade atmosférica de acordo Pasquill-Gifford-Turner

Fonte: Adaptado de MOHAN; SIDDIQUI, 1998.

Onde, A: muito instável; B: instável; C: moderadamente instável; D: neutro; E: moderadamente estável; F: estável e; G: muito estável.

A determinação dos parâmetros de turbulência também pode ser feita a partir da teoria da similaridade de Monin-Obukhov (abordagem quantitativa), adotada na nova geração dos modelos gaussianos, como exemplo o AERMOD, a qual fornece melhores resultados de modelagem do que esquemas qualitativos como o de PasquillGuifford (COMMITTEE FOR THE PREVENTION OF DISASTER PUBLICATION, 2005).

Do exposto, pode-se observar a evolução dos modelos de dispersão ao longo do tempo, permitindo cada vez mais representarem de maneira realística o comportamento da dispersão de poluentes na atmosfera, com a incorporação de terrenos complexos, variações no regime da Camada Limite Atmosférica (CLA), mudança da direção e intensidade do vento e modelagem de mecanismos simples de remoção e reação química dos poluentes (MOREIRA; TIRABASSI, 2004).

A seguir é apresentado um breve descritivo dos principais modelos de pluma gaussiana.

2.8.1 Industrial Source Complex (ISC)

O Industrial Source Complex (ISC) é um modelo de pluma gaussiana de estado estacionário, desenvolvido especificamente para simular a poluição do ar para um complexo industrial típico, levando em conta o efeito de altas chaminés no comportamento da pluma poluente. É usado para ambientes urbanos ou rurais em terrenos planos e moderadamente complexos. Possui inúmeras opções que possibilitam o cálculo de deposição seca do poluente a favor do vento nas chaminés, modelagem da altura da pluma considerando efeitos hidrodinâmicos, além de modelar fontes área, volume e linear. Este modelo foi programado tanto em versão horária de curto prazo (ISCST) e uma versão sazonal ou anual de longo prazo (ISCLT) (U.S. EPA, 1995b).

A base da modelagem é a equação da pluma gaussiana estacionária em linha reta, com algumas modificações para tornar possível simular a dispersão de poluentes de fontes simples ou múltiplas, as quais sofrem influência meteorológicas, de relevo e construções nas suas proximidades. Como resultado, ele estima concentração ou valor de deposição para uma hora de propagação, a partir da combinação de fontes e receptores (NUNES, 2013).

Como dado de entrada para a simulação, o usuário deve fornecer a temperatura dos gases exaustos, a taxa de emissão das fontes, altura das chaminés, direção e velocidade dos ventos. O modelo permite ao usuário especificar uma grade

de receptores através de coordenadas cartesianas (x, y), cuja concentração de poluentes será calculada em cada um desses pontos. A origem do sistema de coordenadas é a base da chaminé, localizada na superfície do solo. A partir da origem, o eixo x (positivo) está na direção a favor do vento, o eixo y representa o vento cruzado (normal à x) e o eixo z é a elevação perpendicular aos eixos x e y (U.S. EPA, 1995b).

A versão mais recente disponível é ISC3, Industrial Source Complex, version 3. Por muitos anos foi o modelo de dispersão recomendado pela U.S.EPA, sendo substituído em 2006 pelo AERMOD. O ISC3 se enquadra como modelo alternativo da U.S.EPA, ou seja, pode ser utilizado em aplicações regulatórias com justificativas, a depender do caso (HANNA et al., 2001).

2.8.2 Modelo AERMOD

O AERMOD é um modelo de pluma em estado estacionário, o qual não considera reações químicas. Usando uma abordagem relativamente simples, o AERMOD incorpora conceitos atuais sobre fluxo e dispersão em terrenos complexos. Onde apropriado, a pluma é modelada como impactando e / ou seguindo o terreno. Além disso, uma das principais melhorias que o AERMOD traz é sua capacidade de caracterizar a Camada Limite Planetária (CLP) por meio de escala de superfície e de camada de mistura (U.S. EPA, 2021).

O AERMOD contém algoritmos avançados para descrever os processos turbulentos de mistura que ocorrem na CLP para condições de camadas estratificadas estáveis ou convectivas (HANNA et al., 2001). Na Camada Limite Estável (CLE), assume que a distribuição da concentração é gaussiana tanto na vertical quanto na horizontal. Na camada Limite Convectiva (CLC), a distribuição horizontal também é assumida como gaussiana, mas a distribuição vertical é descrita com uma função de densidade de probabilidade bi-gaussiana (U.S. EPA, 2021), sendo essa formulação um dos importantes avanços em relação aos demais modelos regulatórios existentes. Além disso, o modelo apresenta algoritmos novos e aprimorados para a representação da ascensão de plumas.

O sistema de modelagem consiste em um programa principal (AERMOD) e dois pré-processadores (AERMET e AERMAP). O AERMET constrói perfis verticais de
variáveis meteorológicas necessários à simulação de dispersão de poluentes com base em medições e extrapolações usando relações de similaridade (escala). Os perfis verticais da velocidade do vento, direção do vento, turbulência, temperatura e gradiente de temperatura são estimados usando observações meteorológicas padrão (direção e velocidade de vento, temperatura ambiente e cobertura de nuvens). Também são necessárias características da superfície (rugosidade da superfície, razão de Bowen e albedo) para construir perfis de similaridade dos parâmetros relevantes da CLP (U.S. EPA, 2021).

O pré-processador de terreno AERMAP faz o pré-processamento dos dados de terreno e de localização das fontes e receptores para posterior uso pelo AERMOD. O AERMAP determina a elevação da base das fontes e dos receptores, enviando estas informações ao AERMOD (U.S. EPA, 2004). Os dados em grade necessários para o AERMAP calcular uma altura representativa do terreno são selecionados a partir dos dados do *Digital Elevation Model* (DEM), que é disponibilizado pelo Serviço Geológico dos Estados Unidos (*United States Geological Survey* – USGS).

A elevação para cada receptor especificado é atribuída automaticamente através do AERMAP. Para cada receptor, o AERMAP transmite as seguintes informações ao AERMOD: a localização do receptor, sua altura acima do nível do mar e a escala de altura do terreno específico do receptor (U.S. EPA, 2021).

2.8.3 Modelo CALPUFF

O CALPUFF é um modelo gaussiano de estado não estacionário utilizado para simulação de *puffs* de poluentes emitidos por uma fonte para os pontos receptores de acordo com o fluxo de vento (LEVY et al., 2002). O CALPUFF permite a simulação da pluma contínua por meio de vários *puffs* discretos de material poluente e a massa de *puff* é dispersa de acordo com uma distribuição gaussiana (WANG et al., 2006).

Em modelos tipo *puff* é feita a avaliação da contribuição de um *puff* na concentração em um ponto receptor por meio de uma abordagem instantânea, no qual cada *puff* é congelado num determinado intervalo de tempo. A concentração desse *puff* naquele dado momento é calculada e, a partir daí, o puff se move, evoluindo em tamanho, intensidade etc. até a próxima amostragem (U.S. EPA, 1998).

As equações básicas utilizadas pelo simulador são a 29 e 30 (SCIRE; STRIMAITIS, YAMARTINO, 2000).

$$C = \frac{Q_p}{2\pi\sigma_x\sigma_y} g_v \exp\left[-\frac{d_a^2}{2\sigma_x^2}\right] \exp\left[-\frac{d_c^2}{2\sigma_y^2}\right]$$
(29)

$$g_{\nu} = \frac{2}{(2\pi)^{1/2}\sigma_z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} exp\left[\frac{-(H_s + 2nz)^2}{(2\sigma_z^2)}\right]$$
(30)

Onde, **C** é a concentração ao nível da superfície no receptor; σ_x , $\sigma_y e \sigma_z$ são os parâmetros de dispersão na direção alinhada (direção **x**), perpendicular (direção **y**) e vertical (direção **z**) em relação ao vento (m); Q_p é a massa de poluente no *puff* (gramas); $d_a e d_c$ são as distâncias do centro do *puff* ao receptor nas direções alinhada e perpendicular em relação ao vento, respectivamente (m); H_s é a altura efetiva do *puff* acima do solo (m), **z** é a altura de mistura e g_v é o termo vertical da equação gaussiana (m).

A sua utilização inclui o uso de um modelo meteorológico (CALMET), de um modelo gaussiano de dispersão (CALPUFF) e de um pós-processador (CALPOST). O modelo CALMET calcula campos horários de vento e temperatura em um domínio de modelagem em grade tridimensional (3D), sendo usados para gerar dados meteorológicos de entrada para o modelo CALPUFF. Além disso, produz altura de mistura, características de superfície e propriedades de dispersão. Finalmente, o CALPOST é um pós-processador para resultados de simulações do CALPUFF (TARTAKOVSKY; BRODAY; STERN, 2013; LEE et al., 2014).

2.9 Modelagem da dispersão de poluentes em tocha

Na modelagem da dispersão de gases, a tocha pode ser modelada como fonte ponto padrão (sem modificação dos parâmetros reais da chaminé), fonte ponto com parâmetros da chaminé modificados (os parâmetros reais da chaminé são modificados para representar melhor as condições durante a queima) ou como "*flare*",

disponível no AERMOD (versões comerciais), conforme diretrizes da U.S. EPA (IOWA DEPARTMENT OF NATURAL RESOURCES, 2018).

As duas últimas opções surgiram, uma vez que a modelagem como fonte ponto padrão não é adequada, visto que as características dos gases exaustos de tochas são muito diferentes das de uma chaminé convencional. As tochas liberam gases exaustos extremamente quentes e turbulentos e têm chamas tipo jato, onde os produtos de combustão emitidos formam uma pluma que começa na extremidade dessas chamas (ONTARIO MINISTRY OF ENVIRONMENT, 2020). Há também arraste de excesso de ar, o que aumenta o volume de gás exausto e diminui a temperatura no fim da chama. Isso normalmente resulta em temperaturas dos gases exaustos variando de 650 a 1000 °C, no final da chama (ONTARIO MINISTRY OF THE ENVIRONMENT, 2020; OHIO ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, 2018).

Essas características, portanto, exigem o cálculo e o uso de "pseudoparâmetros" ou parâmetros virtuais, em substituição aos parâmetros tradicionais das fontes ponto: temperatura (T_s), diâmetro (D_s), velocidade de saída (U_s) e altura de liberação do gases (H_s), os quais não têm significado físico, visto que a combustão ocorre no topo da chaminé.

A utilização de parâmetros virtuais possibilita caracterizar adequadamente a tocha, de modo a garantir que tanto a ascensão da pluma, quanto seu espalhamento sejam razoavelmente representantivos. Os pseudoparâmetros deverão substituir os valores tradicionais como dados de entrada para o modelo.

A Figura 13 apresenta as principais diferenças entre chaminés convencionais e tochas, onde D_s^* , H_s^* , e U_s^* são diâmetro virtual, altura virtual e velocidade virtual da tocha.

Além das diferenças entre as chaminés convencionais e tochas, é importante o entendimento dos principais fatores que controlam a ascensão da pluma: momento e empuxo, ilustrados na Figura 14.

O momento da pluma é a energia que transporta o efluente na direção do vento até um ponto onde as condições atmosféricas controlam sua trajetória. Uma vez emitida, a velocidade de saída de gases numa chaminé é rapidamente reduzida pelo arraste do ar ambiente e pelos efeitos do vento, que fazem com que a pluma se curve à medida que adquire impulso horizontal. Já o empuxo, depende principalmente da diferença de temperatura entre os gases da combustão e do ar ambiente. O vento também reduz o empuxo (ou flutuabilidade) da pluma, quando há o aumento da taxa de entrada do ar circundante mais frio na pluma. Quanto maior a velocidade do vento, mais rápido a pluma se mistura com a atmosfera e esfria, perdendo sua flutuabilidade. Assim, em regiões com ventos fortes, uma pluma não subirá tão alto quanto em regiões com pouco vento (SMITH; SUO-ANTILLA; JACKSON, 2012).



Figura 13 – Diferenças entre tochas e chaminés convencionais

Fonte: Adaptado de MOE, 2020.





Fonte: Adaptado de AER (2021).

2.9.1 Fluxo de empuxo na fonte (F_{bs})

A fórmula de ascensão da pluma de Briggs (1969) é a equação mais comumente usada pelas agências reguladoras na América do Norte para estimar a ascensão de plumas quentes, tanto em chaminés convencionais quanto em tochas. De acordo com Davies e Leahey (1981), a lei de 2/3 da pluma de Briggs pode ser aplicada em tochas, porém deve considerar que, diferentemente das plumas de chaminés, uma tocha libera calor na sua extremidade e pode perder calor por radiação.

Para calcular a ascensão da pluma, as fórmulas padrão de Briggs relacionadas a "fluxo de empuxo" (F_{bs}) e velocidade do vento podem ser usadas (para condições instáveis e neutras). Os modelos padrão de dispersão, nesse sentido, utilizam a lei de potência, para calcular a velocidade de vento na altura da chaminé, conforme Equação 31.

$$u_s = u_1 \left(\frac{h_s}{z_1}\right)^p \tag{31}$$

Onde, u_s é velocidade do vento (m s⁻¹) na altura da chaminé (h_s) (m); u_1 é a velocidade do vento (m s⁻¹) na altura de referência (z_1) e **p** é o expoente da lei de potência referente à estabilidade atmosférica, conforme Tabela 7.

Classes de estabilidade	Expoente rural	Expoente urbano
А	0,07	0,15
В	0,07	0,15
С	0,10	0,20
D	0,15	0,25
E	0,35	0,30
F	0,55	0,30

Tabela 7 – Expoentes de perfis de vento como função da classe de estabilidade para áreas rurais e urbanas.

Fonte: U.S.EPA, 1992.

O F_{bs} nada mais é que uma medida do calor sensível do gás exausto da fonte, sendo um dos componentes principais para os cálculos de ascensão da pluma em modelos de qualidade do ar (NDDH, 2010). No entanto, o modelo AERMOD não permite que o usuário insira diretamente a liberação de calor. Em vez disso, o F_{bs} é calculado a partir da diferença de temperatura do gás exausto da fonte e do ar ambiente. Isso implica em dificuldade ao modelar tocha, pois há uma diminuição na liberação de calor devido às perdas por radiação (OKLAHOMA DEPARTMENT OF ENVIRONMENTAL QUALITY, 2017).

Assim, para obtenção dos parâmetros virtuais necessários para modelagem em tochas, convencionou-se o equacionamento de duas versões de **F**_{bs}, conforme segue.

O **F**_{bs} para fontes pontuais é definido pelas Equações 32 ou 33 (BRIGGS, 1984), incorporadas em ISC-PRIME e AERMOD.

$$F_{bs} = \frac{g}{\pi} \frac{(\rho_a - \rho_s)}{\rho_a} V_s = \frac{\pi}{g} \left(1 - \frac{T_a M_s}{T_s M_a} \right) \approx \frac{g}{4} D_s^2 U_s \frac{(T_s - T_a)}{T_s}$$
(32)

Ou, de maneira simplificada, como:

$$F_{bs} = \frac{gV_s}{\pi} \frac{(T_s - T_a)}{T_s}$$
(33)

Sendo, ρ_a (kg m⁻³) massa específica do ar, ρ_s (kg m⁻³) massa específica do gás da fonte, D_s (m) diâmetro da fonte, **g** (m s⁻²) aceleração da gravidade, M_a (kg kgmol⁻¹) massa molar do ar, M_s (kg kgmol⁻¹) massa molar da fonte, U_s (m s⁻¹) velocidade de saída da fonte, V_s (m³ s⁻¹) vazão volumétrica da fonte, T_a (K) temperatura do ar ambiente e T_s (K) temperatura da fonte, todos na condição do fluxo.

A suposição feita na equação aproximada usada dentro do AERMOD (US EPA, 2021) é que $M_s = M_a$, que pode ser uma aproximação razoável para gases de chaminé quente com excesso de ar.

Para a tocha, a temperatura, velocidade e diâmetro dos gases exaustos não estão prontamente disponíveis. No entanto, conhecemos a energia da pluma quente, como mostra Briggs (1969) pela Equação 34.

$$H_a = \dot{m}_s C_{ps} (T_s - T_a) \cong \dot{m}_f P C I_f^0 F_{pluma}$$
(34)

Onde, H_a (J s⁻¹) taxa de calor sensível (líquido) da fonte liberada na combustão do gás da tocha, \dot{m}_s (kg s⁻¹) vazão mássica da fonte, C_{ps} (J kg⁻¹ K⁻¹) calor específico médio (T_s a T_a) da fonte em base mássica; \dot{m}_f (kg s⁻¹) vazão mássica do gás da tocha antes da combustão, PCI_f^0 (J kg⁻¹) poder calorifico inferior do gás da tocha relativo às condições de referência (15°C e 101,325 kPa na indústria de óleo e gás), F_{pluma} é a fração de calor liberada da pluma.

Conforme pode-se observar na Equação 34, o calor da pluma é aproximado usando o produto da vazão mássica, do **PCI** do gás enviado para queima e da fração de calor liberada (ZELENSKY; ZELT, 2019). Note que o *F_{pluma}* é igual a eficiência da combustão * (1 - perdas de calor por radiação). A U.S. EPA (1986) usa o valor de 45 % (considerando que 55 % do calor é perdido por radiação).

A partir da manipulação das Equações 32 e 34 e a introdução da lei de gases ideais, tem-se a Equação 35, usada pela U.S. EPA (1986).

$$F_{bs} \approx \frac{g}{\pi} \left(\frac{T_s - T_a}{T_s} \right) \frac{\dot{m}_s}{\rho_s} \approx H_a \left(\frac{gR_u}{\pi C_{ps} M_a P_a} \right) \approx \left(\dot{m}_f P C I_f^0 F_{pluma} \right) \left(\frac{gR_u}{\pi C_{pa} M_a P_a} \right)$$
(35)

Ou, de forma simplificada, por:

$$F_{bs} = \frac{gH_a}{\pi C_{pa}\rho_a T_a} \tag{36}$$

Onde a nova variável é $\mathbf{R}_{\mathbf{u}}$ (8,3145 (kPa m³ K⁻¹ kmol⁻¹) a constante universal de gases. As suposições simplificadas feitas são que $M_s = M_a$, $C_{ps} = C_{pa}$ e que PCI_f^0 é usado para aproximar a entalpia da pluma em relação às condições ambientais.

A abordagem da U.S. EPA para tocha usa o F_{bs} definido pela Equação 35. Com uma equação e três variáveis desconhecidas, duas das variáveis devem ser especificadas e, em seguida, a terceira pode ser resolvida. A U.S. EPA (1986) assume T_s^* de 1273 K e U_s^* de 20 m/s, então calcula D_s^* com base na Equação 37:

$$D_{s}^{*} = 2 \sqrt{\frac{F_{bs}}{gU_{s}^{*}} \left(\frac{T_{s}^{*}}{T_{s}^{*} - T_{a}}\right)}$$
(37)

A importância da definição da ascensão da pluma é que a mesma poderá ser incluída no cálculo de altura virtual (H_s^*) de liberação da pluma, que corresponde, de acordo com a U.S. EPA (1986), à soma da altura física da chaminé (h_s), da altura da chama (h_f) e da ascensão da pluma (Δ **h**), como mostrado na Figura 15 (SMITH; SUO-ANTILLA; JACKSON, 2012).



Figura 15 – Formação e ascensão da pluma em tocha.

Fonte: Adaptado de Smith et al., 2012.

O stack tip downwash é calculado com base na razão entre a U_s^* (20 m s⁻¹) e a U_a na altura da chaminé e no D_s^* calculado. Este ajuste do stack tip downwash não tem base física mas, felizmente, só é usado quando a velocidade do vento excede $U_s^*/1,5$ (20/1,5 ~ 13,3 m s⁻¹) e não se aproxima da correção máxima de 3 vezes o D_s^* (ZELT; ZELENSKY, 2019).

2.9.2 Fluxo de momento da fonte (Fms)

De acordo com Briggs (1969), o F_{ms} (m⁴ s⁻²) ou fluxo de momento de fonte pontual pode ser descrito pela Equação 38:

$$F_{ms} = \frac{U_s V_s \rho_s}{\pi \rho_a} = \frac{U_s \dot{m}_s}{\pi \rho_a} = \frac{M_s}{M_a} \frac{T_a}{T_s} U_s^2 \frac{D_s^2}{4} \approx \frac{T_a}{T_s} U_s^2 \frac{D_s^2}{4}$$
(38)

O último termo da Equação 35 é uma aproximação assumindo $M_s = M_a$ e é usado no AERMOD (U.S. EPA, 2021) e para fonte tocha, tem-se a Equação 39.

$$F_{ms} = \frac{U_s^* H_a}{\pi C_{pa} \rho_a (T_s^* - T_a)} \tag{39}$$

Para determinar se uma pluma é dominada pelo empuxo ou momento, a diferença crítica de temperatura (ΔT_c) deve ser determinada. Para condições atmosféricas instáveis ou neutras, as Equações 40 e 41 são recomendadas:

$$\Delta T_{\rm c} = \frac{0.0297 T_{\rm s}^* U_{\rm s}^{*1/3}}{D_{\rm s}^{*2/3}} \, \text{para} \, F_{bs} \, <\! 55 \tag{40}$$

$$\Delta T_{c} = \frac{0.00575T_{s}^{*}U_{s}^{*2/3}}{D_{s}^{*1/3}} \text{ para } F_{bs} \ge 55$$
(41)

Quando $\Delta T (T_s - T_a) \ge \Delta T_c$, a pluma é dominada pelo empuxo e quando $\Delta T < \Delta T_c$, a pluma é dominada pelo momento.

2.10 Metodologias existentes para modelagem em tocha

No modelo SCREEN3 (U.S.EPA, 1995c), a taxa líquida de calor liberada (H_a) é baseada no pressuposto que 55 % da taxa bruta de calor liberado (H_t) é perdida por radiação. Tal pressuposto tem como base o limite superior do *range* sugerido por Leahey e Davies (1984) de que as perdas por radiação podem variar de 20 % a 55 % do H_t . Contudo, as observações desses autores foram feitas em tochas com emissão de fumaça, as quais possuem maiores perdas por radiação. O calor liberado pelo gás na combustão é usado para derivar o diâmetro virtual, enquanto a temperatura (1273 K) e velocidade de saída (20 m s⁻¹) são fixas no SCREEN3.

A altura efetiva é calculada, acrescentando a altura vertical da chama (m) à altura física da chaminé (m). Assume-se para este cálculo, que a chama inclina a 45° da vertical. Tal ângulo foi assumido em uma publicação do *American Petroleum Institute* (API, 1969), conforme as Equações 42 e 43:

$$H_s^* = h_s + h_f \tag{42}$$

$$h_{f} = 0,00456 \left(\frac{H_{t}}{4,1868}\right)^{0,478}$$
(43)

O North Dakota Department of Health (NDDH, 2010), modificou os parâmetros padrão do SCREEN3, onde recomenda para uso na equação de derivação do diâmetro efetivo, valores de 1000 K para temperatura do gás exausto e 40 m s⁻¹ para velocidade de saída. O uso da temperatura ambiente (293 K) é consistente com o SCREEN3.

Na metodologia do *Texas Commission on Environmental Quality* (TCEQ, 2014), alguns valores fixos levam em conta as características da região: no Texas a temperatura ambiente pode variar entre 0°C e 40 °C (273 K a 313 K), baseada na sua faixa típica de temperatura. Assim, foi adotada a temperatura fixa de 308 K, pois fornece uma estimativa razoável e conservadora da ascensão da pluma.

A velocidade média do vento local também é considerada para definição da velocidade de saída dos gases, sendo esta 1,5 vezes a velocidade do vento (boa prática em projeto para evitar o *stack tip downwash*) (BRIGGS, 1969). Como no Texas raramente tem velocidades de vento contínuas superiores a 30 milhas por hora (mph), definiu- se $U_a = 30$ mph. Assim, para a velocidade de saída do gás, o valor de 45 mph (ou 20 m s⁻¹) é assumido. A altura efetiva de liberação é a própria altura da tocha (TCEQ, 2019).

A metodologia adotada pelo *Ontario Ministry of Environment* (MOE) (2020) inova na obtenção de velocidade virtual (U_s^*), como um valor representativo na extremidade da chama, similar à obtenção do diâmetro virtual. Seu cálculo considera tanto o F_{bs} , quanto o F_{ms} . A U_s^* é calculada conforme a Equação 44.

$$U_{s}^{*} = g \frac{F_{ms}}{F_{bs}} \frac{T_{s}^{*} - T_{a}}{T_{a}}$$
(44)

Para o MOE, não considerar o fluxo de momento pode superestimar a ascensão da pluma. Assim, esse parâmetro deve ser calculado na extremidade da

tocha, antes da combustão, sendo chamado agora de F_{mf} (fluxo de momento do gás da tocha), conforme a Equação 45.

$$F_{mf} = \frac{\rho_f}{\rho_a 4} D_f^2 U_f^2 \tag{45}$$

Onde, T_s^* (K) é assumida como 1273 K, ρ_f (kg m⁻³) é a massa específica do gás antes da combustão na pressão e temperatura da tocha e U_f (m s⁻¹) é a velocidade real de saída do gás, antes da combustão, corrigida para pressão e temperatura do gás (no mínimo 1,5 m s⁻¹, de modo a evitar o *stack tip downwash*).

Observa-se que o F_{mf} é calculado com base nos parâmetros físicos da tocha. A corrente de gás exausto, nesse local, se comporta de maneira semelhante a uma chaminé convencional. Presume-se que o F_{mf} seja conservado e, portanto, também é aplicável no fim da chama.

A Tabela 8 apresenta um resumo das considerações para obtenção dos pseudoparâmetros em tocha dos principais órgãos ambientais da América do Norte.

	U.S.EPA	NDDH	TCEQ	MOE
Altura virtual (m)	Altura da chaminé + comprimento de chama	Altura da chaminé + comprimento de chama	Altura da chaminé	Altura da chaminé + comprimento de chama
Diâmetro virtual (m)	Calculado do calor liberado	Calculado do calor liberado	Calculado do calor liberado	Calculado do calor liberado
Temperatura de saída (°C)	1000 (arbitrário)	727 (arbitrário)	1000 (arbitrário)	1000 (arbitrário)
Velocidade de saída (m/s)	20 (arbitrário)	40 (arbitrário)	20 (arbitrário)	Conserva $F_b \in F_m$
Ventos cruzados	Assume que a chama inclina 45° da vertical para todas as velocidades de vento	Assume que a chama inclina 45° da vertical para todas as velocidades de vento	Assume que a chama inclina 45° da vertical para todas as velocidades de vento	Assume que a chama inclina 45° da vertical para todas as velocidades de vento
Perda de calor por radiação (%)	55	55	Baseada no peso molecular do gás	Baseada no peso molecular do gás

Tabela 8 – Pseudoparâmetros em metodologias existentes

Por fim, cita-se a metodologia do *Alberta Energy Regulator* (AER), órgão regulador de Alberta, no Canadá, que desenvolveu modelo de dispersão de liberação de gás ácido com interface de planilha, AERflare, ferramenta regulatória para permitir operações rotineiras e não rotineiras em tochas, usando o AERMOD.

A metodologia AERflare conserva massa, fluxo de momento e fluxo de empuxo. Os métodos de modelos alternativos (citados acima) não conservam o fluxo de momento ou fluxo de empuxo e resultam em alturas de pluma incorretas (AER, 2021).

2.10.1 Planilha AERflare

Conforme descrito anteriormente, a maioria das jurisdições na América do Norte, adota metodologia própria para obtenção de pseudoparâmetros para fonte tocha. Todos relacionam o F_{bs} à taxa de calor liberado e não consideram o F_{mf} (MOE, 2020).

A premissa básica da planilha de cálculo AERflare é determinar o fluxo de momento e de empuxo durante eventos de queima em tochas, os quais são usados para o cálculo de ascensão da pluma. O AERflare usa a energia de empuxo e momento e retrocalcula os parâmetros de fonte equivalente ao tipo chaminé (ou pseudoparâmetros) que podem ser usados como entradas em modelos típicos de dispersão de ar. A partir dos pseudoparâmetros, a ascensão da pluma é corretamente calculada (AER, 2021).

A planilha AERflare tem algumas interfaces, entre elas:

- <u>iStart</u>: nessa aba estão várias seleções e entrada não padrão. Nela são especificadas a temperatura média ambiente e velocidade média de vento, temperatura do gás antes da combustão etc.
- <u>iFacility</u>: nessa aba são inseridos os dados de localização da tocha, tais como Datum, zona UTM coordenadas geográficas e elevação da base.
- <u>iSource</u>: deve-se inserir as informações da tocha, tais como vazões de queima e composição do gás, altura e diâmetro.
- <u>oModelling</u>: é uma aba de saída que exibe os pseudoparâmetros calculados para fonte tocha, que são adequados para a modelagem refinada de dispersão

atmosférica fora da planilha AERflare, com base em dados médios de temperatura e velocidade de vento.

- <u>oCalcflare</u>: é uma aba de cálculo de combustão, a qual lista os cálculos intermediários de balanço de massa e energia da tocha. Os resultados desses cálculos são resumidos na página oModelling.
- <u>Properties</u>: exibe uma lista de referência técnica das propriedades químicas e termodinâmicas usadas nos cálculos.

As informações de temperatura ambiente e do gás antes da combustão são utilizadas para determinar as propriedades químicas da combustão e o balanço de energia em queimas contínuas. A velocidade média do vento é usada para modelagem de dispersão atmosférica de queima continua, de modo a determinar a eficiência de combustão com base na razão da velocidade de saída dos gases e da velocidade do vento ambiente (AER, 2021).

O AERflare ajusta a velocidade do vento da altura de referência do anemômetro para a altura da tocha. Além disso, essa planilha assume como padrão que a temperatura do gás antes da combustão é igual a temperatura ambiente, com base no reconhecimento de que existe um comprimento de tubulação entre as unidades de processo até o queimador da tocha, no qual os gases começarão a atingir uma temperatura de equilíbrio (AER, 2021). Essa premissa não é válida para tocha química, que é isolada e traceada com vapor para manter a temperatura dos gases e evitar sublimação de sais, contudo, a temperatura inicial do gás antes da combustão pode ser selecionada para uma condição não padrão na aba *iStart*.

A cota de base (elevação do terreno) é uma variável importante, pois é utilizada para determinar a pressão atmosférica para os cálculos de combustão. Entradas inadequadas podem resultar em aumento ou diminuição artificial na altura virtual da tocha.

A aba o*Modelling* apresenta um resumo das vazões de gás a serem enviadas para a queima na tocha (gás residual, gás combustível de assistência, vazão de vapor ou ar de assistência). Nessa aba também são listados o calor liberado para a pluma, o PCI_f^0 , a temperatura real estimada da chama e a eficiência da combustão, como base nos valores meteorológicos médios.

A planilha AERflare usa as principais informações de entrada para realizar cálculos de combustão, de modo a determinar a energia líquida disponível para a ascensão da pluma. Por padrão, adota 25 % de perdas de calor por radiação, típico de chamas de gás natural, conforme API 521 (2014). Em seguida, determina os parâmetros de modelagem de dispersão atmosférica adequados para replicar a energia (empuxo e momento) disponível para a ascensão da pluma.

2.10.1.1 Stack tip downwash

Zelensky e Zelt (2019), desenvolvedores da planilha AERflare, sugerem que o AERMOD seja rodado com a opção "*no stack tip downwash*", ou seja, sem considerar a existência de um vácuo puxando a pluma para baixo a favor do vento, devido a própria estrutura da chaminé. Isso porque o "*stack tip downwash*", ocorre na altura real da chaminé e o AERMOD faz esse cálculo incorretamente, utilizando os pseudoparâmetros. Isso é de suma importância, visto que a ascensão da pluma, calculada a partir dos parâmetros virtuais, tem grande influência nos resultados de dispersão no nível do solo. A Figura 16 ilustra esse fenômeno. Observe que a ascensão da pluma começa abaixo da altura real da chaminé.



Figura 16 – Stack tip downwash

Fonte: KUNTZ, 2022.

2.10.1.2 Eficiência de combustão (AER, 2021)

Os pseudo-parâmetros para H₂S em tochas de gás ácido são baseados nos estudos de Kostiuk, Johnson e Thomas (2004), previamente discutido no sibitem 2.4, que mostram que a ineficiência de tochas em ventos fortes é resultado do "*stripping*" de combustível da zona de combustão da chama, conforme ilustra a Figura 17.



Figura 17 – Modelo de remoção de H₂S para parâmetros da tocha

O gás removido é o combustível não queimado e pode conter componentes do gás bruto não oxidado ou parcialmente oxidado, a depender da cinética do componente e tempo de residência em temperaturas mais altas. Os caminhos A e B, indicados na Figura 17, representam os gases brutos que saem da extremidade da chama e sob a chama, respectivamente. Ambos os caminhos têm magnitudes de emissões aproximadamente iguais. O AERflare assume que os gases que saem do caminho B permanecem como H₂S, enquanto os gases que saem do caminho A provavelmente foram aquecidos o suficiente para oxidar o H₂S.

A abordagem para o modelo de fonte de H₂S é baseada na suposição simplificada de que a temperatura dos gases no caminho B é constante e é a média da temperatura do gás bruto e do **LII** dos gases brutos misturados (uma vez que os gases não são queimados, eles têm temperaturas inferiores aos gases de

Fonte: AER (2021).

combustão). Assim, a energia disponível para a ascensão dos gases no caminho B é proporcional à vazão mássica, que é uma função da velocidade do vento.

2.10.1.3 Pseudoparâmetros

O AERflare calcula os pseudoparâmetros D_s^* , $H_s^* \in U_s^*$ para conservar a massa, momento e empuxo da fonte. Nessa abordagem, a temperatura (T_s) é a temperatura real estimada da fonte e a U_s^* inclui o impulso fornecido pelo vapor ou ar auxiliar, em tochas assistidas. A H_s^* é a altura estimada da chama, incluindo a altura da chaminé e o *stack tip downwash*.

Os principais parâmetros que fornecem a parametrização adequada para a ascensão da pluma são detalhados adiante.

O fluxo de empuxo da pluma é dependente da vazão mássica dividida pela pressão atmosférica local, multiplicado por uma constante e a soma de cinco termos, conforme Equação 46 (ZELENSKY; ZELT, 2019).

$$F_{bp} = \frac{\dot{m}_{f}}{P_{a}} \frac{gR_{u}}{\pi M_{a}} \left[\frac{PCI_{f}^{0}F_{pluma}}{C_{pa}} + \frac{C_{pf(T_{f}-T_{0})}}{C_{pa}} + R_{s/f} \left(\frac{M_{a}}{M_{stoich}} - 1 \right) T_{a} - R_{s/f} \left(\frac{C_{pstoich}}{C_{pa}} - 1 \right) (T_{a} - T_{0}) - (T_{a} - T_{0}) \right]$$
(46)

Onde as novas variáveis são: F_{bp} (m⁴ s⁻³) é o fluxo de empuxo da pluma, P_a (kPa) é a pressão atmosférica, C_{pf} (J kg⁻¹K⁻¹) é o calor específico da massa do gás da tocha, $R_{s/f}$ é a razão estequiométrica entre o exausto e a massa de combustível, M_{stoich} (kg kmol⁻¹) é a massa molar estequiométrica dos produtos da combustão, $C_{pstoich}$ (J kg⁻¹K⁻¹) é o calor específico da massa estequiométrica dos produtos da combustão, $c_{pstoich}$ (J kg⁻¹K⁻¹) é o calor específico da massa estequiométrica dos produtos da combustão, T_0 (K) é a temperatura de referência para o **PCI**. O padrão AER para T_f é T_a , mas pode ser modificado pelo usuário.

Observa-se que F_{bp} é independente do excesso de ar, sendo necessárias somente as propriedades estequiométricas de combustão. A Equação 46 confirma

que não se pode aumentar o empuxo de um corrente quente em relação ao ar ambiente adicionando excesso de ar através de arraste.

Na planilha AERflare, a temperatura assumida da massa de gás removida da zona de combustão é definida pela Equação 47.

$$T_{stripped} = 0.5 * (T_{ign} + T_f) + 273,15 = T_s^*$$
(47)

Onde, T_{ign} é a temperatura de ignição do combustível e T_f é a temperatura do gás antes da combustão.

O momento de uma tocha se inicia com o gás antes da combustão saindo na extremidade do queimador. Uma vez que o ar é arrastado, a velocidade da mistura é reduzida para conservação de momento, o gás queima e a massa específica dos produtos da combustão e do gás não queimado diminui à medida que a temperatura aumenta até que todo o gás seja queimado. Para ser conservador, este aumento no momento, devido aos gases quentes é ignorado e o momento do gás é conservado da extremidade da tocha até o final da zona de combustão. O fluxo de momento do gás da tocha (m⁴/s²) é calculado, conforme Equação 48.

$$F_{mf} = \frac{U_f V_f \rho_f}{\pi \rho_a} = \frac{U_f \dot{m}_f}{\pi \rho_a} = \frac{M_f T_a}{M_a T_f} U_f^2 \frac{D_f^2}{4}$$
(48)

Onde, U_f (m s⁻¹) é a velocidade de saída do gás da tocha, V_f (m³ s⁻¹) é a vazão volumétrica da tocha, ρ_f (kg m⁻³) é a massa específica do gás da tocha nas condições de fluxo, M_f (kg kmol⁻¹) é a massa molar do gás da tocha e D_f (m) é o diâmetro real da tocha.

A fonte de H₂S difere da fonte de SO₂, pois o H₂S tem um componente de calor mais baixo que é baseado na remoção de energia da chama por convecção e o momento é calculado a partir do fluxo de massa não combustível, conforme a Equação 49.

$$F_{mstripped} = F_{mf} * (1 - \eta_{conv}) * \eta_{unconv}$$
(49)

Onde η_{conv} é a fração de gás convertida e η_{unconv} é a fração de gás não convertida durante a combustão.

A planilha AERflare considera tanto o F_{bp} quanto o F_{mf} apresentados nas Equações 46 e 48, respectivamente. Com essas duas equações e três variáveis desconhecidas, uma das variáveis deve ser especificada e então as outras duas podem ser resolvidas, conforme Equação 50.

$$U_s^* = \frac{gF_{mf}}{F_{bp}} = \left(\frac{T_s^* - T_a}{T_a}\right) \tag{50}$$

De maneira similar à Equação 50, o D_s^* pode ser calculado pela Equação 51.

$$D_{s}^{*} = 2 \sqrt{\frac{F_{bp}}{gU_{s}^{*}}} \left(\frac{T_{s}^{*}}{T_{s}^{*} - T_{a}}\right)$$
(51)

Por fim, a H_s^* , para fonte de H₂S, pode ser determinada, de acordo com a Equação 52.

$$H_{s}^{*} = h_{s} + \frac{Z_{L}}{2} + 2\min\left(D_{f}\left(\frac{U_{f}}{U_{a}} - 1,5\right), 0\right)$$
(52)

A altura virtual é determinada pelo cálculo da altura vertical da chama (Z_L) usando o modelo de chama de Brzustowski (1976), onde para H₂S, altura virtual considera a metade da altura vertical da chama, mais a altura real da tocha e o *stack tip downwash*, baseado no diâmetro real da tocha e na razão de $U_f \in U_a$.

Conforme já mencionado, esse modelo permite determinar a posição da extremidade da chama ao longo de um eixo de jato adimensional e, em seguida, converte para as distâncias vertical e a favor do vento usando a razão da extremidade da chama pelo momento de vento cruzado e o diâmetro da real da tocha. O *flare tip stack downwash* já está contabilizado, portanto, o AERMOD deverá ser executado com a opção *no stack tip downwash* (NOSTD).

O grande diferencial da metodologia AERflare é que ela evita as simplificações das metodologias existentes. Conforme explicado previamente, a base para o cálculo de F_{ms} e F_{bs} , em termos de parâmetros de chaminé (**D**_s, **V**_s, **T**_s) foi simplificada (BRIGGS, 1969) com base na presunção de que emissões de chaminés convencionais são emissões relativamente quentes (cerca de 200 °C), tem baixa velocidade (cerca de 20 m /s) e propriedades semelhante ao ar. Para emissões que não atendem essas suposições ou com entradas arbitrárias para os parâmetros da chaminé, a energia não é conservada e a ascensão equivocada da pluma resultará em concentração de poluentes no nível do solo sub ou superestimada (AER, 2021).

Hoje, na modelagem de dispersão atmosférica de tochas, as suposições básicas para formulação de F_{ms} e F_{bs} são excedidas. As tochas possuem plumas muito quentes (> 600 °C), jatos com ampla faixa de velocidades e, muitas vezes, uma composição de gás que difere em relação ao peso molecular. O AERflare continua a utilizar as equações fundamentais de F_{ms} e F_{bs} , contudo, evitando simplificações para que tais parâmetros sejam corretos e, portanto, representem de forma mais realista a ascensão da pluma na atmosfera (AER, 2021).

2.11 Odor e percepção odorante

O termo odor pode ser definido como uma mistura complexa de moléculas químicas voláteis, emitidas, na sua maioria, por atividades industriais, domésticas e agrícolas (LE CLOIREC et al.,1994). Por várias décadas, sabe-se que eles têm potencial de causar efeito adversos ao ser humano, tais como estresses emocionais, desconforto, dores de cabeça, depressão, náuseas e vômitos (NATIONAL RESEARCH COUNCIL COMMITTEE ON ODORS, 1979; CAPELLI et al., 2013).

Os odores também são a maior causa de reclamações da população às autoridades locais (HENSHAW; NICELL; SIKDAR, 2006) e por serem considerados contaminantes atmosféricos, estão sujeitos à regulação do Estado (AATAMILA et al., 2011). Em alguns países europeus, foi relatado que entre 13 % e 20 % da população se incomoda com odores ambientais (HUDON et al., 2000).

Tal percepção de odor se dá por dois canais: fisiológico e psicológico. A resposta fisiológica é dada pela interação de contaminante com os receptores olfativos. Assim que o olfato humano entra em contato com a substância odorífera, sinais são enviados ao cérebro, onde as impressões do odor são criadas e

comparadas com memórias armazenadas (SHERIDAN, 2008). Logo, essas sensações são baseadas na experiência do receptor, que definirá o grau de incômodo (DRAVNIEKS; JARKE, 1980), através da resposta psicológica.

O viés psicológico é responsável por reações físicas, como dores de cabeça, náuseas, estresse etc. na presença de odores incômodos desconhecidos, mesmo que não estejam necessariamente associados a um risco para a saúde humana (AATAMILA et al., 2011). Observa-se, portanto, que as respostas individuais a um odor são altamente subjetivas.

Além da percepção de odor variar entre indivíduos, também varia na mesma pessoa com o tempo (habituação e adaptação) (MILHAU; HAMELIN; TATRY, 1994). As respostas olfativas dependem ainda da idade (maior idade está associada com a diminuição da sensibilidade), com o sexo (mulheres, em média, tem um limiar de percepção de odor mais baixo do que homens da mesma faixa etária), estado de saúde (resfriado, alergia nasal) e hábito de fumar (STUETZ; GOSTELOW; BURGESS, 2001).

2.11.1 Características do odor

O odor possui algumas características que podem ser medidas. Segundo McGinley e McGinley (2002) elas podem ser agrupadas em cinco dimensões principais, descritas a seguir:

- <u>Detectabilidade ou limiar do odor</u>: refere-se à concentração mínima teórica de estímulo odorífero necessário para detecção em um percentual específico da população (em geral 50 %) (U.S. EPA, 1992).
- <u>Intensidade</u>: é a força percebida ou a magnitude da sensação de odor, aumentado como uma função da concentração (RIVM, 2009). Para sua quantificação são usadas escalas de intensidade, nas quais a intensidade percebida de um odor é comparada à intensidade de um produto químico padrão (NICELL, 2009).
- <u>Tom hedônico ou desagradável</u>: representa a aceitabilidade do odor (DAMUCHALI; GUO, 2020; NIMMERMARK, 2011). A percepção da hedonicidade fora do laboratório pode ser influenciada por experiência subjetiva, frequência de ocorrência, intensidade e duração do odor (U.S. EPA, 1992).

- <u>Caráter ou qualidade do odor</u>: descreve em palavras (descritores de odor) com o que um odor se parece. Os descritores incluem termos como de peixe, terroso, floral. O odor é caracterizado utilizando um vocabulário de referência para gosto, sensação e descrição do odor (MCGINLEY; MCGINLEY, 2002).
- <u>Persistência</u>: descreve a taxa na qual a intensidade percebida de um odor reduz à medida que o odor sofre o processo de diluição na atmosfera, a partir da fonte, a favor do vento (MCGINLEY et al., 2000).

2.11.2 Fatores que afetam o impacto odorante

Por muito tempo, os fatores que compõem o padrão de impacto do odor no ambiente foram descritos em termos de frequência, intensidade, duração e ofensividade, conhecido pelas iniciais FIDO (WATTS; SWEETEN, 1995). Posteriormente, o ambiente receptor, ou seja, a localização espacial do odor, também foi adicionada, gerando o termo mais atual FIDOL (FREEMAN; CUDMORE, 2002).

Esses fatores influenciam a extensão em que o odor afeta negativamente os indivíduos, as comunidades e podem ser utilizados como base para diagnósticos e avaliações de impacto odorante (NICELL, 2009). A Tabela 9 descreve, resumidamente, cada um dos fatores "FIDOL".

Fatores	Descrição	
Frequência (com que frequência o	Relacionada a um percentil, o qual fornece o	
receptor é exposto ao odor)	número permitido de excedências de um limite	
	de concentração de odor específico	
Intensidade	Nível de odor (concentração)	
Duração	Tempo decorrido durante o qual o odor é	
	percebido	
Ofensividade	Definida pelo caráter do odor (definição	
	subjetiva da (des) agradabilidade do odor	

Tabela 9 - Fatores que determinam o grau de incômodo odorante

Localização Relacionada ao uso do solo no entorno de uma fonte de odor; localização de comunidades ou indivíduos fora dos limites das instalações emissoras do odor

Fonte: DEFRA (2010); BRANCHER et al. (2017).

2.11.3 Fontes e principais compostos odoríferos em refinarias de petróleo

Os odores em uma refinaria de petróleo são devido às seguintes substâncias: composto sulfurados, incluindo sulfeto de hidrogénio (H₂S), mercaptanas, sulfetos e dissulfetos; compostos nitrogenados, incluindo amônia (NH₃) e aminas e; hidrocarbonetos, incluindo Compostos Orgânicos Voláteis (COVs), cetonas, aldeídos, ácidos orgânicos, fenóis e aromáticos. Já as principais fontes de odor incluem: armazenamento (petróleos e derivados); dessalinização de água; refino de petróleo bruto; estação de tratamento de efluentes, incluindo separador água-óleo, unidade de Flotação por Ar Dissolvido (DAF) descobertas, unidades de biotratamento; tochas (produtos não queimados) e operações de carregamento (CONCAWE, 2020).

A Tabela 10 apresenta os processos de refino e compostos com potencial de odor em refinarias de petróleo.

Processo (fonte)	Compostos odoríferos	
Alquilação	Os fumos advindos bacias de neutralização	
Armazenamento	Compostos sulfurados, COVs.	
Tochas	Compostos sulfurados, NH₃ e COVs.	
Refino do petróleo bruto	H ₂ S, aldeídos complexos, ácidos orgânicos e componente fenólico	

Tabela 10 – Processos de refino e compostos odoríferos

Água ácida da produção de petróleo	H ₂ S, aromáticos, cetonas, aldeídos e ácidos
	graxos.
Ar ventado dos processos de adoçamento de	Compostos sulfurados
gás (remoção de gás ácido)	
Desparafinação para produzir óleo lubrificante	Compostos sulfurados
Estação de tratamento de efluentes	Compostos sulfurados (incluindo H ₂ S) e
	compostos nitrogenados
Gerenciamento de cáusticos usados para	Hidrocarbonetos, mercaptanas e H ₂ S.
absorver e remover H ₂ S, mercaptanas e	
contaminantes fenólicos de fluxos de produtos	
intermediários e finais	

Fonte: CAPELLI et al. (2020); CONCAWE, (2020).

Para redução de odor nesses processos podem ser utilizadas medidas operacionais e de prevenção. Em tochas, por exemplo, recomenda-se a redução de vazões rotineiras para queima e melhoria na eficiência da combustão e, em tanques de armazenamento, recomenda-se a instalação de vedações duplas em tetos flutuantes.

Além dessas medidas, tecnologias de tratamento e controle (fim de tubo) podem ser implementadas, tais como incineração, tratamento de gás residual com reagente granular, biofiltração e *gas scrubber* (absorção) (CAPELLI et al., 2020; CONCAWE, 2020).

Na Tabela 11 são apresentadas as características de alguns compostos odoríferos presentes em refinarias de petróleo, bem como seus respectivos limites de percepção olfativa.

Composto	Caráter do odor	Faixa de limite percepção (ppm)
Compostos sulfurados		
Sulfeto de hidrogênio – H ₂ S	Ovo podre	0,0005 - 1,4
$Dimetilsulfeto - C_2H_6S$	Vegetais podres	0,0012 - 8,11
$Dimetildissulfeto-C_2H_6S_2$	Alho, pútrido	0,0029 - 1,45
Metanotiol – CH₄S	Repolho podre, alho	0,51 x 10 ⁻¹² – 0,56
Etanotiol – C ₂ H ₆ S	Repolho podre	0,87 x 10⁻⁵ – 18
Dióxido de enxofre – SO2	Metálico	0,33 – 8
Compostos pitrogenedos		

Tabela 11 – Caráter de odor e valores de limites de odor de compostos odoríferos

Compostos nitrogenados

Amônia – NH₃	Pungente, irritante	0,043 - 60,3
Metilamina – CH₅N	Peixe	0,0075 - 4,8
Dimetilamina – C ₂ H ₇ N	Amoniacal, peixe podre	0,0076 - 4,2
Trietilamina – C ₆ H ₁₅ N	Peixe, pungente	0,0002 - 1,82
Dióxido de nitrogênio – NO2	Água sanitária	0,058 - 0,5
Compostos aromáticos		
Benzeno – C ₆ H ₆	Aromático, doce, solvente	0,47 – 313
Tolueno – C7H8	Azedo, queimado	0,021 – 157
Etil benzeno – C ₈ H ₁₀	Oleoso, solvente	<0,002 - 18
Xileno (o-, m-, p-isômeros) – C ₈ H ₁₀	Doce, empireumático	0,012 - 316
Trimetilbenzeno (todos os isômeros) – C ₉ H ₁₂	Aromático	0,006 - 24
Ácidos orgânicos		
Ácido fórmico – CH ₂ O ₂	Pungente	0,52 - 3,40
Ácido acético – CH ₂ O ₂	Vinagre, pungente	0,004 - 204
Ácido propiônico – C3H6O2	Azedo	0,0099 - 4,65
Aldeídos e cetonas		
Acetaldeído – C ₂ H ₄ O	Pungente, sufocante,	0,0015 – 1000
	frutado, maça	
Acetona – C ₃ H ₆ O	Doce, frutado	0,40 – 11745
Metil isopropil cetona – C₅H₁₀O	Doce, pungente	0,51 – 4,8
Metil propil cetona – C₅H₁₀O	Esmalte	0,028 – 65
Fenóis		
$Fenol - C_6H_5OH$	Ácido, tinta, empireumático	0,045 – 1,95

Fonte: PICCARDO et al. (2022).

Observa-se que os compostos sulfurados reduzidos têm seus limites de percepção de odor em baixíssimas concentrações, sendo, portanto, os principais responsáveis por causar incômodos, seguidos pelos compostos nitrogenados. Outro ponto de destaque é que em muitos processos, esses compostos encontram-se misturados e em diferentes concentrações, o que pode levar a intensificação (sinergismo) ou redução (antagonismo) do limite de percepção olfativa (SHERIDAN, 2008).

2.11.4 Odor e efeitos para a saúde

O tema odor é muito complexo, conforme descritos nos tópicos anteriores, logo faz-se necessário o aprofundamento dos possíveis efeitos na saúde humana, cuja via de entrada no organismo pode ser respiratória ou cutânea. A manifestação de sintomas vai depender da concentração e do tempo da exposição aos odorantes, bem como pelo seu potencial de irritação e/ou biotransformação em metabólitos nocivos (PICCADO, 2022).

Os possíveis efeitos tóxicos do H₂S e NH₃, frequentemente mais presentes em emissões odoríferas, são detalhados nas Tabelas 12 e 13.

Exposição (ppm)	Sintomas
0,024 – 23	Limite de odor
2 – 5	A exposição prolongada pode causar lacrimejamento, dores de cabeça,
	perda de sono ou náuseas. Constrição brônquica em alguns pacientes
	asmáticos
20	Possível fadiga, perda de apetite, dor de cabeça, irritabilidade, falta de
	memória, tonturas.
50 - 100	Leve conjuntivite e irritação do trato respiratório após 1 h. Pode causar
	distúrbios digestivos e perda de apetite.
100	Tosse, irritação nos olhos, perda do olfato após 2 a 15 minutos (fadiga
	olfativa). Respiração alterada, sonolência após 15-30 min. Irritação da
	garganta após 1 h. Aumento gradual da gravidade dos sintomas ao longo de
	várias horas. A morte pode ocorrer após 48 h.
100 – 150	Perda do olfato (fadiga ou paralisia olfativa).
100 – 150	Conjuntivite acentuada e irritação do trato respiratório após 1 h. Edema
	pulmonar pode ocorrer por exposição prolongada.
500 - 700	Cambaleante, colapso em 5 min. Danos graves aos olhos em 30
	min. Morte após 30-60 min.
700 – 1000	Rápida inconsciência ou colapso imediato dentro de 1-2 respirações,
	a respiração para. Morte em poucos minutos.
1000 – 2000	Morte quase instantânea

Tabela 12 – Efeitos tóxicos da exposição ao H₂S por inalação

Fonte: PICCARDO, 2022.

Tabela 13 – Efeitos tóxicos da exposição aguda à NH₃ por inalação

Exposição (ppm)	Sintomas
0,04 - 60	Limite de odor
50	Irritação imediata dos olhos, nariz e garganta (2 horas de exposição)

Exposição (ppm)	Sintomas
100	Irritação rápida dos olhos e trato respiratório
250	Tolerável pela maioria das pessoas (30 a 60 minutos de exposição)
700	Irritação imediata dos olhos e garganta
>1500	Edema pulmonar, tosse, laringoespasmo
2500–4500	Fatal (30 min. De exposição)
5000-10000	Rapidamente fatal devido à obstrução das vias aéreas; também pode
	causar danos à pele

Fonte: PICCARDO, 2022.

2.12 Avaliação de impacto ambiental de emissões odorantes

De acordo com Nicell (2009), existem duas abordagens distintas para avaliação do impacto ambiental do odor, que podem ser aplicadas de maneira individual ou conjunta, quais sejam: caracterização da fonte e posterior previsão dos impactos na circunvizinhança ou medições diretas do odor em campo. Na primeira, ocorrem medições de vazões volumétricas e coleta de amostras, que fornecem a taxa de emissão do odorante, sendo um dado de entrada para modelos de dispersão atmosférica. Na segunda abordagem, podem ser feitas investigações e análise de queixas, inspeções em campo e olfatômetro de campo.

2.12.1 Modelagem da dispersão atmosférica de odor

A modelagem de dispersão de odores na atmosfera pode utilizar diferentes tipos de modelos matemáticos, possibilitando a estimativa da variação temporal e espacial das concentrações de odor, considerando dados meteorológicos, topográficos e de emissão (CONTI; GUARINO; BACENETTI, 2020). Essa ferramenta tem sido amplamente aplicada em várias situações, principalmente modelos gaussianos, tais como ISC, CALPUFF e AERMOD (MCINTYRE, 2000; HENSHAW; NICELL; SIKDAR, 2006; YU et al. 2009; LATOS et al., 2011).

Esses modelos matemáticos podem ser úteis e efetivos para avaliar a dispersão de odores, a partir de dados de emissões disponíveis e para correlacionar

com queixas, além disso, permitem estimar a concentração máxima em um determinado local, de modo e evitar reclamações (MCINTYRE, 2000). Contudo, os resultados dos modelos gaussianos fornecem concentrações, no mínimo, horárias, não sendo representativos para avaliar o incômodo, cuja percepção é instantânea pelo olfato humano.

A importância da escolha de tempos médios em simulações pode ser percebida pela análise da Figura 18. Quanto menor o intervalo de tempo entre os dados, mais instantâneos são os resultados de concentração, logo, mais distantes dos valores médios e mais próximos da realidade, eles são.



Figura 18 – Concentração de gases odoríferos em função do tempo

A área preenchida na cor cinza indica que valores de pico de concentração de um composto odorífero podem permitir a percepção de odor, ainda que o valor médio esteja abaixo do limite de detecção (BOEKER et al., 2001).

Diante do exposto, faz-se necessário ajustar o código do modelo de dispersão para tornar o cálculo mais realista possível. Nesses casos, geralmente é utilizada uma relação "pico-média", que converte concentração médias de longos períodos para médias de curto período. Isto é feito com o objetivo de imitar a percepção do sistema olfativo humano (DREW et al., 2007; PIRINGER et al., 2007; SCHAUBERGER; PIRIGER, 2012).

Fonte: DOURADO, 2007.

O método mais amplamente adotado para estimar concentrações médias de curto intervalo de tempo, com base em períodos médios mais longos (por exemplo, 1h) é expresso na Equação 53 (NICELL, 2009).

$$C_p = C_m \left(\frac{t_m}{t_p}\right)^u \tag{53}$$

Onde C_m é a concentração média para o maior tempo de integração, t_m ; C_p é a concentração média para o menor tempo de integração, t_p ; e u é um expoente empírico (adimensional) que depende do grau de turbulência atmosférica (ou seja, estabilidade atmosférica) e geralmente varia de 0,17 a 0,68 (NICELL, 2009). Um valor u de 0,28 tem sido comumente usado para converter concentrações entre tempos médios (NICELL, 2009).

Além da Equação 53, em análises de dispersão de odores, alguns estudos fornecem uma relação dose-resposta que correlaciona as concentrações de odor com a Probabilidade de Detecção (PD) de um odor específico, que pode ser estimada pela Equação 54 (NICELL, 2003):

$$PD = \frac{100}{1 + \left(\frac{C_t}{C}\right)^{\frac{1-p}{p}}}$$
(54)

Onde **PD** (%) representa a probabilidade de detecção de um odor, **C** é a concentração do composto odorífero (ppb), C_t é a concentração limite do composto odorífero específico (ppb) e **p** (adimensional) é a "persistência da resposta" do odor específico (NICELL, 2003). O valor de **p** varia de 0 a 1, a depender do composto. Para esse estudo, o valor de **p** adotado foi de 0,4 (baseado em observações da porcentagem de pessoas que conseguem identificar a existência de H₂S em uma faixa de concentração (AMOORE, 1985). A concentração limite para H₂S foi fixada em 4,7 ppb (LEONARDOS; KENDALL; BARNARD, 1969).

De forma semelhante, outra relação foi proposta para avaliar o incômodo causado pelos odores (NICELL, 2003), de acordo com a Equação 55.

$$GI = \frac{10}{1 + \left(\frac{C_{5AU}}{C}\right)^{\frac{1-\alpha}{\alpha}}}$$
(55)

Onde **GI** (unidade de aborrecimento, **AU**) representa o grau de incômodo às pessoas variando de 0 a 10, **C** é a concentração do composto odorífero (ppb), **C**_{5AU} corresponde às concentrações odoríferas onde o desconforto das pessoas tem um valor de 5 UA e o termo α (adimensional) é a "persistência do incômodo" do odor específico (variando de 0 a 1) (NICELL, 2003). Com base em observações de pessoas incomodadas com a existência de H₂S na atmosfera os parâmetros **C**_{5AU} e α foram estimados em 23 ppb e 0,68, respectivamente (AMOORE, 1985).

2.12.2 Avaliação do impacto odorante em campo

A avaliação do odor em campo tem como vantagem a correspondência dos resultados encontrados à real percepção olfativa do receptor no ambiente e não uma tentativa de representação da realidade como as obtidas por modelos de dispersão, a partir de medidas no nível de emissão. Essas avaliações, contudo, só poderão ser realizadas com o início de operação do empreendimento (VIEIRA, 2013).

Umas das formas de avaliação é por meio de investigação e análise de queixas, sendo amplamente utilizadas como indicadores da existência de um problema relacionado a odor, principalmente em áreas densamente povoadas (UK ENVIRONMENT AGENCY, 2002). Contudo, apresentam algumas desvantagens (MINISTRY FOR THE ENVIRONMENT, 2016):

- Algumas pessoas podem estar relutantes em reclamar, ou simplesmente não sabem a quem reclamar;
- As pessoas podem parar de reclamar sobre um problema contínuo se sentirem que nenhuma ação está sendo tomada;
- A tolerância aos odores é subjetiva e varia consideravelmente com a percepção individual;
- As vezes pode ser difícil identificar a causa de problemas específicos de odor, de modo que uma atividade pode ser erroneamente culpada pelas ações de outra;

• Redução de queixas, devido à habituação ao odor.

Assim, de modo geral, não se sabe com que precisão o número de queixas relacionadas à percepção de odores irá refletir o nível geral de incômodo da comunidade.

Nessa abordagem alguns pontos devem ser considerados: se uma inspeção no local não for possível, as informações de data, hora e local podem ser usadas com os dados operacionais da suposta fonte e dados meteorológicos (dos registros de monitoramento) para ajudar a determinar se a reclamação é válida. Além disso, as reclamações devem sempre ser registradas, mesmo quando a reclamação não puder ser investigada por uma inspeção no local (MINISTRY FOR THE ENVIRONMENT, 2016).

Outras abordagem para avaliações do impacto de odor podem ser feitas através de instrumentos, como olfatômetro de campo portátil, inspeções de campo, rede de percepção de odor (realizada por moradores das comunidades do entorno de uma fonte de odor, que registram observações através de cartões-resposta), questionários repetidos (indivíduos da comunidade selecionados para avaliar rotineiramente seu nível de incômodo em horários e locais pré-estabelecidos) e enquete olfatométrica (diagnóstico da qualidade do ar relativo à percepção de odores, através da aplicação de questionários) (VIEIRA, 2013).

3 METODOLOGIA

3.1 Caracterização da área de estudo

O estudo foi realizado em uma refinaria de petróleo, que tem como principal objetivo maximizar a produção de derivados de petróleo e aumentar a oferta desses produtos no mercado brasileiro local. Os fornos e caldeiras da refinaria queimam tanto gás natural quanto de refinaria e o gás ácido é enviado temporariamente para queima em um sistema de tocha até que a Unidade de Recuperação de Enxofre (URE) retorne da manutenção.

Abaixo, as principais características da área de estudo que afetam a dispersão atmosférica:

- Está instalada em um Complexo Industrial Portuário: existem bem próximo à Refinaria, uma petroquímica e uma fábrica de bens de consumo (alimentos, bebidas, produtos de limpeza e higiene pessoal);
- A topografia da área tem predomínio de terreno montanhoso;
- Climatologia: sofre influência do sistema de brisas (nas estações de outono e inverno – abril a julho).
- O uso e ocupação do solo: caracterizado por grandes extensões de áreas de mangue, mata, monocultivo (cana de açúcar), zona antropizada, solo exposto, área urbana e industrial.
- A dispersão é favorecida, pois o complexo industrial encontra-se em área litorânea plana com temperaturas elevadas (~ 27 °C), alta precipitação pluviométrica (> 1.000 mm ano ⁻¹), além de sofrer influência de ventos alísios de nordeste, com velocidade média em torno de 3 m s⁻¹.

3.2 Sistema de tocha química

Os alívios ou descartes ácidos são enviados para a rede de alívio do sistema de tocha química, composto por coletores e um vaso *knock-out*. Nesse vaso, gotículas

líquidas são removidas, evitando seu arraste para a tocha. O condensado separado é destinado para o sistema de água ácida, enquanto a fase gasosa é destinada para a tocha química. O vaso ainda recebe uma injeção de gás de purga (GC) proveniente do vaso separador de GC, que retém partículas de líquido e evita arraste para os pilotos, o que pode provocar sua obstrução e possível apagamento.

O GC é utilizado como gás de purga para evitar entrada de ar no sistema, além de também ser destinado para os pilotos para promover o acendimento e o início da queima. Também pode ser utilizado como gás de assistência para a queima estável.

A tocha química é composta por queimador com quatro pilotos e não possui quaisquer meios de assistência, como vapor ou ar. Além disso, dispõe de selagem de topo para evitar a entrada de ar, do tipo selo fluídico.

O projeto do sistema de tocha química foi feito para receber as contribuições das seguintes Unidades:

- Unidade de Tratamento de Águas Ácidas (UTAA);
- Unidade de Regeneração de Amina (MDEA);
- Unidade de Hidrotratamento de Diesel (HDT-D);
- Unidade de Hidrotratamento de Nafta de coque (HDT-N).

Como a URE está em manutenção, os descartes de gases ácidos para o sistema de tocha se dão de forma contínua. Nesse cenário, a Refinaria além de controlar as emissões máximas de SO_x, também controla a carga de enxofre máxima na matéria-prima.

As unidades do bloco de enxofre (UTAA e MDEA) são as principais responsáveis pelo envio de gás ácido para queima na tocha química. Na UTAA, as correntes são provenientes do vaso de carga da unidade e do topo da retificadora de água ácida; já na MDEA, as correntes são provenientes do vaso de separação de amina rica e da torre de regeneração de amina.

3.3 Caracterização das correntes enviadas para a tocha

Os dados de vazão foram obtidos através da ferramenta *Plant Information (PI),* cujo objetivo é capturar, processar, analisar e armazenar qualquer tipo de dados para

as devidas análises através de informações disponibilizadas por meio de telas gráficas com dados coletados a partir do Sistema Digital de Controle Distribuído (SDCD).

O PI coleta informações de medidores de vazões instalados no limite de bateria das unidades, os quais permitem identificar quais unidades estão aliviando. Além disso, no coletor principal da tocha, também existem medidores ultrassônicos que permitem identificar o descarte geral da Refinaria.

As Tabelas 14 a 17 apresentam as composições médias das correntes provenientes das Unidades contribuintes para queima em tocha.

Componentes	% molar	% mássica
H ₂ S	96,0	95,0
C ₃ H ₈	4,0	5,0

Tabela 14 – Composição do gás ácido da MDEA

Componentes	% molar	% mássica
H ₂	80,0	16,4
CH ₄	6,0	9,8
C_2H_6	3,0	9,2
C ₃ H ₈	3,0	13,5
C_4H_{10}	3,0	17,8
C ₅₊	4,1	30,2
H ₂ S	0,9	3,1

Tabela 15 – Composição dos gases da HDT-D

Tabela 16 – Composição dos gases da HDT-N

Componentes	% mol	% mássica
H ₂	60,0	6,6
C ₃ H ₈	35,0	84,1
H_2S	5,0	9,3

A Tabela 17 indica que a Unidade de água ácida está enviando uma corrente muito rica em água (pode prejudicar a eficiência da combustão), onde uma resolução simples seria a inclusão de mais um resfriador ao processo.

Componentes	% mol	% mássica
H ₂ S	9,6	16,8
NH ₃	13,7	12,0
H ₂ O	76,7	71,2

Tabela 17 – Composição dos gases da UTAA

Além dos gases acima mencionados, a tocha também recebe o gás de purga, cuja composição é mostrada na Tabela 18.

Tabela 18 – Composição do gás combustível

Componentes	% mol	% mássica
H ₂	14,0	1,7
CH ₄	74,0	73,4
C_2H_6	9,0	16,7
C_3H_8	3,0	8,2

Por fim, a Tabela 19 mostra a composição total do gás enviado para a tocha, correspondendo a operação normal da Refinaria, contemplando todas as correntes elencadas nas tabelas predecessoras.

Componentes	% molar	% mássica	toneladas/dia
H2	48,65	6,22	14,92
CH4	2,76	2,81	6,74
C2H6	1,23	2,35	5,65
C3H8	11,59	32,39	77,74
C4H10	0,79	2,92	7,02
iC4H10	0,39	1,45	3,48
C5+	1,62	7,42	17,82
H2S	6,90	14,90	35,78
NH3	3,86	4,17	10,00
H2O	22,21	25,36	60,90

Tabela 19 – Composição da corrente enviada para queima na tocha

Sobre a corrente e condições operacionais, algumas informações devem ser destacadas:

- A velocidades no bocal está abaixo de 18,2 m s⁻¹. Segundo a U.S.EPA, nessa condição, não se esperam problemas com descolamento de chama.
- As temperaturas de chama deveriam variar entre aproximadamente 673 °C a 1000 °C. Contudo, a temperatura da chama pode ser maior devido à grande quantidade de hidrocarbonetos e hidrogênio na corrente.

3.3.1 Inventário de emissões

Neste estudo, a dispersão atmosférica de H₂S não queimado da tocha foi analisada. Embora a refinaria possua outras fontes de emissão de H₂S, como a Estação de Tratamento de Efluentes Industriais e outras fontes externas à refinaria, este estudo apenas considerou a fonte tocha, devido às altas vazões de H₂S enviadas para queima.

3.4 Histórico de reclamações

A Refinaria realiza rondas diárias para que possa preencher o questionário de registro de percepção de odor em 6 pontos externos em seu entorno. Além da ronda diária, as denúncias externas podem ser feitas por meio do canal telefônico para reclamações (Atendimento ao Cliente).

A Figura 19 mostra os principais pontos de reclamação que circundam o *site* da refinaria, a tocha e as Estações de Monitoramento de Qualidade do ar (EMQAs), dispostos sobre as curvas do terreno.

O ponto 1 é uma empresa de produtos químicos, o ponto 2 é uma fábrica de bens de consumo, o ponto 3 é uma via com pedágio, o ponto 4 é um campus universitário e os pontos 5 e 6 são vilas e condomínios residenciais com cerca de 4.000 habitantes.

A Figura 20 ilustra os números de reclamações referentes ao ano de 2018, período no qual a URE esteve indisponível, reportadas pela Refinaria.

Figura 19 - Tocha e pontos de reclamação





Figura 20 – Número de reclamações reportadas pelo público em 2018



3.5 Caracterização meteorológica

Existem duas EMQAs ao redor da refinaria. Na Figura 19, elas são referidas como EMQA A, localizada a 5 km da tocha (norte da refinaria) e EMQA B, localizada a 2 km da tocha (oeste da refinaria).
Essas EMQAs processam os dados na forma de médias horárias, no próprio local, online e em tempo real, a concentração dos parâmetros de qualidade do ar e meteorologia. As médias são transmitidas para a central de telemetria e armazenadas em servidor de banco de dados, sendo validadas tecnicamente para posterior disponibilização através de boletins diários no endereço eletrônico do órgão regulador.

A EMQA A é a única que aquisita parâmetros meteorológicos tais como temperatura, umidade relativa, radiação solar, precipitação, velocidade do vento e direção do vento. No entanto, não monitora a cobertura de nuvens, logo, para este estudo, este parâmetro foi obtido do aeroporto mais próximo (PROTIM, 2022) que está localizado a 40 km da Refinaria.

Os dados meteorológicos horários de superfície adquiridos pelo AQMS A, para o ano de 2018, foram utilizados para realizar a dispersão atmosférica de H₂S. A Figura 21 mostra os padrões de vento para este período, com direção predominante de Sudeste.



Figura 21 – Rosa dos ventos para o período de 2018 (blowing from)

3.6 Configuração do modelo de dispersão atmosférica

Todas as simulações de dispersão atmosférica foram realizadas com o software AERMOD View, versão 9.9.0, em terrenos elevados e opção de área rural. Uma vez que o resultado do modelo é apresentado em médias horárias, a relação pico-média foi utilizada para converter valores horários para médias de curto período de 5 s, equivalente à respiração humana.

A área de estudo foi configurada como sendo um setor de 20 km × 20 km (domínio de simulação) ao redor da tocha, onde foi aplicada uma grade multicamadas (sistema que combina características de grades grosseiras e grades refinadas), sendo atribuídos três níveis, configurados da seguinte forma:

- Para uma distância de até 3,5 km (próximo à fonte tocha e receptores discretos), o espaçamento entre camadas foi de 250 m;
- Para uma distância de até 6 km, o espaçamento entre camadas foi de 500 m e,
- Para uma distância de até 10 km, o espaçamento entre camadas foi de 1.000 m, perfazendo um total de 1.522 receptores.

Os dados Shuttle Radar Topography Mission (STRM3) do United States Geological Service (USGD) foram selecionados para especificar a elevação do terreno na área (WEBGIS, 2022).

3.7 Modelagem numérica

3.7.1 Desenvolvimento do modelo

Todas as simulações foram realizadas usando o pacote CFD ANSYS FLUENT 2022 R1. Para reduzir o tempo computacional, foram utilizadas configurações de computação paralela e cada caso analisado foi executado em 160 processadores em paralelo. As simulações foram realizadas em um modelo 3D e apenas soluções em regime permanente foram obtidas. A geometria da tocha foi criada no *Spaceclaim* e foi assumido que o gás aliviado e o gás dos pilotos têm uma saída comum no centro, a fim de reduzir sua complexidade. A altura da tocha é de 130 m, seu diâmetro interno é de 0,762 m. No entanto, para as simulações, apenas a extremidade da tocha é de interesse, cuja altura é de 3,7 m e velocidade de saída é de 11,8 m s⁻¹ (considerando a existência dos retentores de chama), os quais foram incluídos na geometria do *tip*, conforme ilustra a Figura 22.

Figura 22 – Detalhe do tip da tocha considerado na simulação



Em relação às condições de contorno do modelo CFD, o vento cruzado foi considerado como entrada de velocidade, sendo a superfícies de entrada a vazão mássica de velocidade; combustível do piloto e entrada de gás como superfície de entrada de fluxo de massa; a direção do fluxo foi mantida normal à superfície; a turbulência das superfícies de entrada de velocidade foi especificada pela intensidade da turbulência e pelo diâmetro hidráulico; a superfície inferior de todo o domínio, da chaminé e do queimador foram definidas como saída para o ambiente. Para maior precisão do fluxo turbulento perto da superfície limite da chaminé, o *Shear-Stress Transport* (SST) foi usado.

As superfícies nas quais os fluxos saem do domínio foram definidas como a saída de pressão, sendo especificada por um valor de pressão manométrica igual a zero.

A geometria e as dimensões do domínio computacional estão representadas na Figura 23.



Figura 23 – Domínio computacional de condições de contorno

Os valores da velocidade do vento estão na altura do anemômetro (10 m) da EMQA A no momento da observação, sendo necessário obter a velocidade do vento na altura da chaminé (130 m) para a simulação CFD. Para isso, foi utilizada a lei de potência, conforme recomendado pela US EPA (1992), na condição de estabilidade neutra.

A malha computacional (Figuras 24 e 25) foi construída a partir *do* ANSYS Fluent Meshing (versão 2022 R1) e possui aproximadamente 5,38 milhões de volumes do tipo *polyhexcore*. Esse tipo de malha é predominantemente formado por hexaedros (utilizados na região do *bulk*). Além disso, também é formado por prismas nas paredes (para representar a camada limite) e poliedros, que são usados como camada intermediária para conectar os hexaedros e os prismas, a fim de preservar a qualidade dos elementos.

Este tipo de malha combina as vantagens da utilização de elementos hexaédricos e poliédricos, permitindo gerar malhas com menos elementos, maior qualidade ortogonal, alinhadas com a direção do fluxo e capazes de se adaptar a geometrias complexas (ANSYS, 2021).

Conforme mostrado nas Figuras 24 e 25, a densidade da malha próxima à chaminé e na direção do vento, onde a chama se curva, foi mantida maior que as demais regiões do domínio, a fim de aumentar a precisão do fluxo de reação nesta região de interesse. A grade final foi verificada para *skewness* e ortogonalidade, ambos os parâmetros são comumente usados para verificar a qualidade das malhas. A assimetria foi de 0,63 e a ortogonalidade mínima foi de 0,1611.

Figura 24 – Malha computacional



Figura 25 – Detalhe da malha computacional



3.7.2 Métodos de CFD para simulação numérica em tochas

Pela sua simplicidade, descrição geralmente correta do comportamento do escoamento e menor esforço computacional, nesse trabalho, foi utilizada o Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS).

A turbulência foi simulada com o SST k – ω (*Shear-Stress Transport k-\omega*), o qual representa com acurácia a transferência de calor do fluido para a parede (velocidade zero na parede para formar perfil de camada limite) e a combustão com *Non-premixed model (mixture fraction + PDF)* para queima rápida de chama de altas temperaturas. Para o cálculo da energia térmica da radiação do jato, o modelo de ordenadas discretas (OD) foi empregado.

O coeficiente de absorção de gases de combustão usou o modelo de soma ponderada de gases cinzas, baseado em domínio (WSGGM).

3.7.3 *Design* de experimentos

O DOE "*Design of Experiments*" ou "Planejamento de Experimentos" é uma ferramenta estatística muito utilizada para determinar a melhor configuração que um conjunto de variáveis controláveis deve apresentar para maximizar um resultado de interesse no processo.

Nesse trabalho, foram realizados sucessivos testes que envolveram modificações intencionais de variáveis importantes para a combustão na tocha, cujo objetivo foi determinar quais dessas variáveis independentes (variáveis de entrada) têm maior impacto sobre uma determinada variável resposta (concentração de H₂S no nível do solo).

Esses testes são importantes, pois o melhor valor de uma única variável, nem sempre indica o melhor conjunto de variáveis para redução da variável resposta. O melhor valor de uma variável de entrada para reduzir a variável de resposta indica o mínimo local. No entanto, pode haver um mínimo global para a variável de resposta que pode ser alcançado por um conjunto de variáveis de entrada diferentes daquelas que são otimizadas individualmente.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Essa seção é dividida em 3 partes, conforme segue: (i) resultados relativos à modelagem de dispersão de H₂S no AERMOD, (ii) *design* de experimentos e (iii) modelagem CFD.

4.1 Modelagem de dispersão atmosférica de H₂S no AERMOD

4.1.1 <u>Valores de máxima concentração de H₂S no nível do solo</u>

As Probabilidades de Detecção (PDs) de H₂S e o grau de incômodo (GI) foram estimados para 4 cenários operacionais.

O Cenário 1 envolveu a simulação da composição do gás mostrada previamente na Tabela 19, que representa a real dinâmica operacional da queima na tocha. Nesse cenário, a corrente possui um alto percentual de inerte (água), o que pode prejudicar a combustão devido à redução do LII da mistura.

O Cenário 2 simulou a composição do gás mostrada na Tabela 20. Neste cenário, houve a inclusão de mais um resfriador na UTAA, de modo a reduzir a quantidade de inerte (água) enviada à tocha.

Componentes	t dia ⁻¹	% Molar
H ₂	14,92	52,86
CH ₄	6,74	3,04
C ₂ H ₆	5,65	1,36
C ₃ H ₈	77,74	12,74
C4H10	7,021	0,87
iC4H10	3,481	0,43

Tabela 20 – Composição da corrente enviada para a tocha no Cenário 2

Componentes	t dia ⁻¹	% Molar
C ₅₊	17,818	1,78
H ₂ S	35,78	7,59
NH₃	9,69	4,09
H ₂ O	37,98	15,24

O Cenário 3 também considerou a inclusão de um resfriador na UTAA, tal como o Cenário 2, além de um aumento na vazão de gás combustível (predominantemente metano) equivalente a 3,36 t h⁻¹ para proporcionar um acréscimo de 10 % (valor arbitrário) no poder calorífico inferior (em massa) do gás enviado para a queima. A composição desta corrente é mostrada na Tabela 21.

Componentes	t dia ⁻¹	% Molar
H ₂	16,13	42,51
CH ₄	66,01	21,86
C ₂ H ₆	19,13	3,38
C ₃ H ₈	84,47	10,17
C4H10	7,03	0,64
iC4H10	3,50	0,33
C ₅₊	17,84	1,31
H ₂ S	35,80	5,58
NH ₃	9,64	3,01
H ₂ O	38,03	11,21

Tabela 21 – Composição da corrente enviada para a tocha no Cenário 3

No Cenário 4, há um aumento de 1,2 vezes (produção estimada em um futuro próximo) da vazão mássica liberada no Cenário 1. A sua composição é mostrada na Tabela 22.

Componentes	t dia ⁻¹	% Molar
H ₂	17,91	48,65
CH ₄	8,08	2,76
C ₂ H ₆	6,77	1,23
C ₃ H ₈	93,29	11,59
C4H10	8,43	0,79
iC ₄ H ₁₀	4,18	0,39
C ₅₊	21,38	1,62
H ₂ S	42,94	6,90
NH ₃	12,00	3,86
H ₂ O	73,07	22,10

Tabela 22 – Composição da corrente enviada para a tocha no Cenário 4

As informações sobre os parâmetros da tocha e do gás de queima para cada cenário são fornecidas nas Tabelas 23 e 24.

Com as informações dos parâmetros do gás, a planilha AERflare calcula o PCI bruto e PCI líquido. Os LIIs foram calculados em planilha Excel, conforme Equação 3 apresentada previamente no referencial teórico.

Tabela 23 – Parâmetros da chaminé da tocha e gás de queima

Cenário		1	2	3	4
		•	-	•	-
Parâmetros	Unidade	Valor	Valor	Valor	Valor
Vazão mássica para a tocha	kg h⁻¹	10.002	9.040	12.400	12.002
Peso molecular da corrente	kg kgmol ⁻¹	15,77	15,65	15,81	15,77
Massa específica do gás	kg m ⁻³	0,5451	0,5409	0,5461	0,5451
(antes da combustão)					
Vazão volumétrica para a		11 000	11 010	10 000	14.000
tocha (*)	111° 11 '	11.090	11.040	10.030	14.020
Velocidade de saída do gás	m s⁻¹	11,2	10,2	13,8	13,4
Diâmetro da tocha	m	0,762	0,762	0,762	0,762
Pressão atmosférica do <i>site</i>	kPa	101,325	101,325	101,325	101,325

Cenário		1	2	3	4
Parâmetros	Unidade	Valor	Valor	Valor	Valor
Altura da tocha	m	130	130	130	130
Temperatura do gás	°C	80	80	80	80
PCI bruto (*)	MJ m ⁻³	24,75	27,13	30,12	24,75
PCI líquido (*)	MJ m ⁻³	22,26	24,41	27,12	22,26
LII	% vol.	4,58	4,07	4,15	4,37

(*) 15 °C, 101,325 kPa

Tabela 24 – Parâmetros de entrada para a modelagem de dispersão atmosférica

Cenário	1	2	3	4
Parametro				
Temperatura virtual (K)	519,46	519,30	534,45	519,46
Velocidade virtual (m s ⁻¹)	0,20	0,18	0,26	0,24
Diâmetro virtual (m)	1,41	1,33	1,04	1,34
Taxa de emissão de H ₂ S (g s ⁻¹)	0,701	0,572	0,373	0,765
Eficiência da conversão modelada (%)	99,50	99,63	99,73	99,51
Fração de gás não queimado (%)	43,71	43,84	37,56	40,55
Altura virtual (m)	133,21	133,28	134,19	133,64
Temperatura ambiente (K)	300,15	300,15	300,15	300,15
Fluxo de empuxo do gás não queimado (m ⁴ s ⁻³)	0,41	0,33	0,30	0,44
Fluxo de momento do gás não queimado (m ⁴ s ⁻²)	0,01	0,01	0,01	0,01

Apenas pela análise das Tabelas 23 e 24, já é possível inferir sobre a estabilidade da chama, onde em todos os cenários tem-se: as velocidades de saída do gás estão abaixo de 18,2 m s⁻¹, não sendo esperados problemas relacionados a descolamento de chama; os **LIIs** dos gases são menores do que 15,3 % em volume, suficiente para manter uma boa eficiência de combustão e; densidades de energia dos gases acima de 20 MJ/m³, garantindo estabilidade da chama. Essas características combinadas contribuem para a elevada eficiência de combustão acima de 99,5 % obtida em todos os cenários analisados.

O passo seguinte é carregar o AERMOD com os parâmetros virtuais calculados na planilha AERflare e apresentados na Tabela 24, cujos resultados de concentração de H₂S são em médias horarias. Em seguida, o modelo é ajustado para considerar concentrações médias de curto período (5 s), sendo os resultados apresentados na Tabela 25 e Figuras 26 a 29.

Valores máximos									
	Cenário 1		Cenário 2		Cenário	o 3	Cenário	o 4	
Local	PD	GI	PD	GI	PD	GI	PD	GI	
	(%)	(AU)	(%)	(AU)	(%)	(AU)	(%)	(AU)	
Max.*	77,69	4,12	72,96	3,93	58,75	3,46	79,39	4,19	
Ponto 1	53,64	3,32	46,58	3,12	36,72	2,85	56,66	3,40	
Ponto 2	28,67	2,63	22,74	2,44	13,73	2,10	30,96	2,69	
Ponto 3	61,76	3,55	56,40	3,39	41,22	2,97	63,86	3,62	
Ponto 4	41,07	2,97	37,67	2,88	24,46	2,50	41,98	3,00	
Ponto 5	41,12	2,98	35,65	2,83	22,83	2,45	43,42	3,04	
Ponto 6	27,47	2,59	23,75	2,48	14,24	2,13	28,79	2,63	

Tabela 25 – Resultados da modelagem em receptores específicos em relação à probabilidade de detecção (PD) de H₂S e grau de incômodo (GI) para os 4 cenários

*Ponto de máxima concentração absoluta dentro dos limites da Refinaria.

As Figuras de 26 a 29 mostram as curvas de probabilidade de detecção de H₂S, para os 4 cenários em média de curto período (5 s).

Figura 26 – PD de H₂S – Concentração máxima (Cenário 1)





Figura 27 – PD de H₂S – Concentração máxima (Cenário 2)





Figura 28 – PD de H₂S – Concentração máxima (Cenário 3)





Figura 29 – PD de H₂S – Concentração máxima (Cenário 4)





Para todos os cenários, os resultados sugerem que as maiores PD e GI ocorrem no site da refinaria, próximo à tocha. Nos Cenários 1 e 4, onde há maiores taxas de emissão de H₂S, há altas probabilidade de que o odor seja detectado, 77,69

% e 79,43 %, respectivamente e, essas probabilidades diminuem à medida que a distância da fonte aumenta, exceto quando existem algumas características peculiares no terreno. Da análise do Cenário 1, devido ao baixo limiar de detecção do H₂S, o PD pode ser em torno de 41 %, mesmo a uma distância de 3,5 km da tocha.

O ponto mais susceptível ao odor fora do site da refinaria é o ponto 3, localizado na direção predominante de ventos e relativamente perto da tocha (1,6 km), no qual a PD pode chegar a 64% (Cenário 4). Contudo, é uma via de pedágio, logo, para a maioria dos passantes, há curta exposição.

O Cenário 2 revela uma pequena redução de PD e GI em todos os pontos analisados, uma vez que a remoção de material inerte (água) aumenta o poder calorífico, o que melhora a eficiência da combustão.

O Cenário 3 também proporciona o aumento do poder calorífico. Neste Cenário, além de uma maior eficiência de combustão em relação aos Cenários 1 e 2, há uma maior altura virtual de liberação da pluma e aumento da ascensão da pluma, fatores que proporcionam uma redução de 19 % na probabilidade de detecção de odor, em comparação com o Cenário 1.

Por fim, o Cenário 4 avalia o impacto do aumento da vazão de gás enviada para tocha, quando mantidas as condições do Cenário 1. Nesse caso, houve pouca diferença em relação ao Cenário 1, sendo o principal fator o aumento das emissões, causado por um aumento na carga de H₂S na corrente.

A partir das simulações, percebe-se que a redução de inertes (água) na corrente enviada para a queima, bem como o aumento da injeção de gás combustível, leva a maior redução de H₂S no nível do solo. No entanto, a injeção de gás combustível incorre em custos financeiros, bem como no aumento das emissões de gases exaustos. Assim, não é razoável adotar tais medidas operacionais, baseando-se apenas na análise das máximas concentrações absolutas ao nível do solo, as quais são decorrentes de eventos meteorológicos críticos (inversões térmicas, estabilidade atmosférica etc.) ocorridos no período de estudo.

Essa afirmação pode ser feita a partir da geração de um arquivo de *rank* com as 1000 máximas relativas aos dados meteorológicos de 2018, gerando o histograma mostrado na Figura 30 para o Cenário 1.



Figura 30 – Histograma de concentração de H_2S de 5 s (Cenário 1)

Uma vez que o total de dados meteorológicos disponíveis para simulação são relativos a um ano, tem-se disponível 8.262 horas (descontando dos dados faltantes). Da análise do histograma, pode-se dizer que a milésima concentração mais alta corresponde ao valor de 5 ppb, logo, por se trata de um *ranking*, as demais horas restantes (7.262 horas) têm concentração inferior ao valor mínimo apresentado na Figura 30, ou seja, na maior parte do tempo, as concentrações de H₂S no nível do solo estarão abaixo do limiar de percepção de odor (4,7 ppb). Pode-se afirmar, portanto, que a máxima concentração é configurada como um *outlier,* estando muito acima dos valores de concentrações frequentes de ocorrer.

O gráfico *boxplot* ilustrado na Figura 31, que contempla as 1000 máximas de um ano de dados meteorológicos mostra que os *outliers* são maiores que 9 ppb, sendo a concentração mínimo de 5 ppb, sendo um *boxplot* assimétrico negativo. Claramente, se a análise envolvesse todas as horas disponíveis de um ano de dados meteorológicos, o valor mínimo seria ainda menor que 5 ppb.



Figura 31 – Boxplot das 1000 máximas de um ano de dados meteorológicos

 H_2S

4.1.2 <u>Resultados relativos a percentis</u>

Uma alternativa disponível no AERMOD para análise de dados estatísticos, sem a necessidade de construção de histograma de frequência, inclui a n-ésima maior previsão, onde n é escolhido pelo usuário para fornecer percentis comumente usados (como o percentil 98, que é a maior concentração ao nível do solo em cada receptor, após 2 % das previsões mais altas serem removidas). Isso significa que em 98% dos casos, as concentrações estarão abaixo da concentração máxima (P98). Logo, os percentis representam a concentração máxima simulada para cada um dos receptores, eliminando-se os casos atípicos, igualmente como apresentado no subitem anterior.

Para fins de comparação com a Figura 26 (caso de concentração máxima absoluta do Cenário 1), serão apresentados, a seguir, os resultados do P90, P99 e

P98. A avaliação do P90 visa a comparação com os percentis 99 e 98 para saber se os altos valores de concentração são contínuos ou esporádicos.

Após análise dos resultados do cenário de máxima absoluta, bem como dos três percentis, relativo ao Cenário 1, foi possível a compilação dos valores máximos apresentados na Tabela 26.

Tabela 26 - Resumo dos resultados da simulação

PD máxima	PD de P90 (máxima)	PD de P98 (máxima)	PD de P99 (máxima)
77,69 %	21,72 %	33,77 %	44,00%



Figura 32 – Probabilidade de detecção (%) de H₂S – P90 (cenário 1)

As Figura 32, 33 e 34 mostram os percentis 90, 99 e 98, respectivamente, dos valores médios de curto prazo (5 s) na curva de probabilidade de detecção de odor.



Figura 33 – Probabilidade de detecção (%) de H₂S – P98 (cenário 1)

Figura 34 – Probabilidade de detecção (%) de H₂S – P99 (cenário 1)



Como ilustram as referidas Figuras, com o auxílio dos percentis pode-se realizar uma análise mais realista do impacto do odor no bem-estar da vizinhança, pois a probabilidade de detecção de odor nos principais pontos analisados cai para 9 % (considerando o P99). Esses resultados são mais consistentes com o número de

reclamações (14) para o ano de 2018 apresentado na Figura 20. As Figura 32, 33 e 34 também ilustram melhor a influência da direção do vento predominante na dispersão, pois pode-se observar que a direção principal do odor é noroeste, sendo o principal ponto afetado o 3 (é também o ponto mais próximo da tocha).

As diferenças entre os valores de percentil 99, 98 e 90 demonstram a frequência que as respectivas concentrações máximas são obtidas. Quando os valores de percentil 98, 99 e 90 são próximos, a frequência das concentrações próximas ao percentil 90 são maiores. Quando são diferentes, as frequências dos valores próximos ao percentil 98 e 99 são mais frequentes.

A maior frequência de concentração de odor seria em torno de 33,77 % (no ponto mais crítico), relativo ao P98, pois os valores de percentis estão mais distantes, confirmando pouca regularidade nas concentrações observadas. De maneira, conservadora, para a gestão das emissões de odor, pode-se utilizar como referência o P99.

Em geral, da análise dos percentis, pode-se dizer, que na maior parte do tempo, as concentrações dentro e fora do *site* da refinaria estarão abaixo do limiar de percepção de odor. Pela análise das Figuras 32, 33 e 34, pode-se observar que existem baixas concentrações no sentido Sudoeste – Noroeste, resultados condizentes com a rosa dos ventos na Figura 21, que indica baixa incidência de ventos nesta direção. Esses resultados sugerem que pode haver outra fonte de emissão de odor, que não a tocha, relacionadas a reclamações no ponto 1.

4.2 Design de experimentos

Foi realizado um planejamento fatorial de três variáveis com dois fatores (2³), correspondendo a 8 testes, conforme segue:

 Água no gás enviado para queima (variável A): redução e aumento de 20 % da vazão de água em relação ao Cenário 1;

 Gás combustível (variável B): aumento de 1 e 10 % na vazão de gás combustível em relação ao Cenário 1;

 Temperatura do gás enviado para queima (antes da combustão) (variável C: 80 °C e 200 °C). As variáveis elencadas acima foram escolhidas com base no referencial teórico que indica grande influência sobre a combustão e consequentemente na dispersão. Os percentuais sobre as variáveis foram escolhidos arbitrariamente, exceto os valores de temperatura, que correspondem ao valor da temperatura operacional (80°C) e da temperatura de projeto (200 °C).

A Tabela 27 apresenta os resultados obtidos em cada um dos 8 testes. O caso 7 apresentou o melhor resultado pela maior redução de água e aumento da injeção de gás combustível na corrente analisada, que influenciam no aumento **PCI** do gás. Esses valores têm uma forte influência na eficiência da combustão, pois refletem uma menor vazão mássica de H₂S não queimado liberada na atmosfera. Adicionalmente, a temperatura mais alta do gás resultará em um aumento na temperatura da chama (ver Tabela 28) e melhorará sua estabilidade (observe que os casos 2 e 6 apresentam os mesmos valores para PCI, mas a maior temperatura do gás no caso 6 promove maior temperatura de chama em relação ao caso 2). A temperatura mais alta levará ao maior empuxo de gás e maior elevação da pluma, refletida no aumento da altura efetiva de liberação, calculada pela planilha AERflare, conforme a Tabela 28.

Caso	Água (A) t d ⁻¹	Gás combustível (B) kg h ^{.1}	Temperatura (C) ° C	H₂S ppb (5 s)
1	48,72	2.918	80	6,59
2	72,18	2.918	80	7,48
3	48,72	7.248	80	4,49
4	72,18	7.248	80	4,92
5	48,72	2.918	200	5,87
6	72,18	2.918	200	6,62
7	48,72	7.248	200	3,95
8	72,18	7.248	200	4,33

Tabela 27 – Planejamento fatorial para obtenção da concentração mínima de H₂S (concentrações máximas absolutas)

Tabela 28 – Pseudoparâmetros e condições de descarga para cada teste

Cenário	1	2	3	4	5	6	7	8
Parâmetro								
Temperatura virtual (K)	533,0	532,91	543,5	543,49	593,0	603,52	532,91	592,9
Temperatura estimada de chama (K)	923,40	925,09	975,24	976,55	292,95	931,97	981,77	983,34
Velocidade virtual (m s ⁻¹)	0,263	0,282	0,373	0,393	0,352	0,377	0,499	0,526
Diâmetro virtual (m)	1,081	1,127	0,873	0,901	0,940	0,980	0,756	0,779
Taxa de emissão de H ₂ S (g s ⁻¹⁾	0,418	0,484	0,286	0,318	0,380	0,439	0,257	0,286
Eficiência da conversão modelada (%)	99,69	99,62	99,76	99,72	99,70	99,63	99,77	99,73
Fração de gás não queimado (%)	38	38	32	32	36	36	30	30
Altura virtual (m)	134,05	133,96	135,11	135,02	134,28	134,19	135,39	135,30
Temperatura ambiente (K)	300,15	300,15	300,15	300,15	300,15	300,15	300,15	300,15
PCI bruto (MJ m ⁻³)	28,77	27,10	31,21	26,87	28,77	27,10	31,21	26,87
PCI líquido (MJ m ⁻³)	25,90	24,40	28,10	28,83	25,90	24,40	28,10	29,83
Fluxo de empuxo do gás não queimado (m ⁴ s ⁻³)	0,33	0,38	0,31	0,35	0,38	0,44	0,45	0,39
Fluxo de momento do gás não queimado (m ⁴ s ⁻²)	0,01	0,01	0,01	0,02	0,01	0,02	0,02	0,02

A grande vantagem da metodologia é que ela permite verificar possíveis interações entre as variáveis independentes e determinar quais têm maior influência sobre a variável alvo (concentração de H₂S no solo). A Figura 35 ilustra os principais efeitos sobre a concentração de H₂S ao nível do solo e as interações entre as variáveis avaliadas.





Pode-se inferir da análise da Figura 35 que o aumento da injeção de gás combustível (de 1 para 10 %) reduz, em média, aproximadamente 2,2 ppb na concentração de H₂S ao nível do solo, pois é a variável que tem maior impacto. Seguese um aumento da temperatura (de 80 para 200 °C) do gás enviado para combustão, ação que reduz, em média, cerca de 0,68 ppb nos níveis de concentração de H₂S ao nível do solo. Por fim, deve-se notar que o aumento da água (de 48,72 para 72,18 t d⁻¹) no gás enviado para combustão eleva o nível de H₂S no nível do solo, em média, em 0,61 ppb.

Com relação às interações, há pouco sinergismo em A x C, A x B x C e um resultado um pouco melhor em A x B. Assim, em geral, os efeitos das variáveis A, B e C podem ser analisados individualmente.

Dessa análise, fica claro entender o motivo do Cenário 2 corresponder ao pior cenário operacional, uma vez que combina a menor vazão de gás combustível, menor temperatura do gás enviado para queima e maior teor de água. O teor de inerte aumenta a absorção do calor de combustão (já reduzido, pois tem o menor acréscimo de gás combustível), resfriando a chama e retardando a propagação da combustão de um gás não tão quente, que ainda possibilita a condensação do vapor de água, pois está abaixo de 100 °C.

No caso das gotículas chegarem à zona de combustão, haverá a extração de energia para evaporação, reduzindo a temperatura dos gases exaustos. Tais efeitos são observados nos parâmetros virtuais obtidos, quais sejam menor temperatura de chama, refletindo na menor altura virtual. Apesar disso, o Cenário 2 ainda possui elevada eficiência, pois apresenta densidade mínima de energia superior a 20 MJ/m³, suficientes para estabilidade da chama.

Da análise da Tabela 27, conclui-se que os melhores casos (com concentrações máximas abaixo de 4,7 ppb) são os com maiores injeções de gás combustível que, pela interpretação da Figura 35, é o parâmetro individual que melhor contribui para a redução de concentração de H₂S no nível do solo. Contudo, ao incluir na análise os valores de percentis, não se justifica o aumento da vazão de gás combustível, cuja queima implica no aumento de emissões de gases exaustos, tendo em vista que os valores de máximas são considerados *outliers* e, raramente, tendem a ocorrer *no site.*

Assim, conclui-se que a melhor solução operacional é o Cenário 5, onde haveria um aumento da temperatura do gás enviado para a queima, inclusão de um resfriador e menor injeção de gás combustível. A concentração máxima de 5,87 ppb corresponde a uma PD de 58,26 %, porém, de acordo com o P99, a PD de odor será de 44 % dentro do site.

4.3 Modelagem CFD

4.3.1 Validação da modelagem numérica

Para validação da modelagem numérica, foi considerada, para fins de comparação, a imagem da chama, bem como a medição de seu comprimento.

O comprimento da chama aqui considerado corresponde à distância do ponto de liberação até o ponto mais distante do limite da chama, que inclui o *lift off* (se houver). Para validação do modelo CFD, as imagens da câmera de monitoramento da tocha foram selecionadas. Como as chamas podem se mover significativamente ao longo do tempo devido à flutuação do vento, as dimensões da chama estão sujeitas a erros. Para determinar a geometria da chama a partir de fotografias, é essencial ter uma referência vertical e um comprimento de referência. Nesse estudo de caso, a chaminé da tocha principal forneceu a referência vertical e a distância entre os centros dos queimadores forneceu a escala (3000 mm), conforme Figura 36.

A tocha de hidrocarbonetos (também chamada de principal, pois recebe os maiores alívios) e a tocha química apresentam o mesmo o suporte de sustentação, sendo localizadas lado a lado. Para simplificação, não foi considerada na simulação a tocha principal e assumiu-se que haveria pouca influência na chama da tocha química, devido a pouca quantidade de gás aliviado pela tocha principal (referente ao piloto e a purga).

O comprimento da chama a partir de análise visual ou imagens de chama é chamado de "comprimento visível da chama", sendo considerado como referência para aqueles obtidos por outros métodos. No presente estudo, o envelope de chama em 3D apresentado na Figuras 37, considera que a chama pode ser visualizada a partir de uma isosuperfície de fração mássica de CO igual a 0,01, conforme previamente informado no referencial teórico.

Figura 36 – Extremidade das tochas



Figura 37 – Previsão CFD mostrando perfil 3D de fração mássica de CO versus imagem de monitoramento da chama



A comparação entre a imagem obtida pela câmera e a simulação indica que a forma prevista da chama tem uma boa concordância com a imagem obtida em campo. Pequenas diferenças que existem podem ser atribuídas a incertezas na estimativa da taxa de fluxo de massa durante a captura das imagens, a velocidade e direção do vento em relação à orientação da liberação e aproximações nas teorias de modelagem. A tocha está em atmosfera aberta e as condições do vento não foram controladas durante todo o período de monitoramento. No que diz respeito ao comprimento de chama, o modelo CFD apresentou uma boa correspondência.

4.3.2 <u>Simulação numérica: condições operacionais e velocidades de vento</u>

Nesse subitem são feitas duas análises comparativas, conforme segue:

Condição operacional (op.) real para duas velocidades de vento (1,2 m s⁻¹ e 3,5 m s⁻¹), mantendo-se a composição e vazão de gás;

Condição operacional real (Cenário 1) versus condição operacional ótima (Caso 7 do design de experimentos), mantendo-se a velocidade de vento (3,5 m s⁻¹) e sendo alteradas composição e vazão do gás.

Procurou-se fazer correlações entre os resultados da modelagem numérica (morfologia da chama) e os pseudoparâmetros da metodologia AER para os dois casos supramencionados.

A Tabela 29 a seguir apresenta os pseudoparâmetros, bem como dados de eficiência da tocha obtidos da planilha AER, para as 2 condições de vento e operacionais avaliadas nas simulações numéricas.

Tabela 29 – Parâmetros de entrada para a modelagem de dispersão atmosférica para diferentes velocidades de vento

Velocidade de vento (m/s)	3,5	3,5	1,2
Condição	Caso 7	Op.	Op.
Parâmetro			
Temperatura virtual (K)	603,52	519,46	519,46
Velocidade virtual (m s ⁻¹)	0,49	0,20	0,20

Velocidade de vento (m/s)	3,5	3,5	1,2
Condição	Caso 7	Ор.	Ор.
Diâmetro virtual (m)	0,756	1,330	0,895
Taxa de emissão de H ₂ S (g s ⁻¹)	0,257	0,621	0,283
Eficiência da conversão modelada (%)	99,77	99,53	99,61
Altura virtual (m)	135,39	133,61	137,5
Temperatura ambiente (K)	300,15	300,15	300,15

As Figuras 38 e 39 mostram a morfologia da chama e sua distribuição de temperatura para as diferentes condições de vento, respectivamente.

Figura 38 – Perfis de fração mássica de CO na chama (com escala limitada a 0,01) A) velocidade de vento de 1,2 m s⁻¹ B) velocidade de vento de 3,5 m s⁻¹



Figura 39 – Distribuição de temperatura obtida na simulação numérica A) velocidade de vento de 1,2 m s⁻¹ B) velocidade de vento de 3,5 m s⁻¹



Da análise das Figura 38 e 39, é possível observar a influência do vento sobre tamanho e forma da chama. Nota-se a diminuição do comprimento visível da chama com o incremento do vento e inclinação da chama: em velocidade de vento de 1,2 m s⁻¹, o comprimento de chama obtido numericamente foi de 15,59 m e para velocidades de vento de 3,5 m s⁻¹, o comprimento de chama foi de 12,09 m.

Os comprimentos mais curtos das chamas em ventos cruzado resultam em menor eficiência de combustão porque menos oxigênio é arrastado para chamas menores e menos calor pode ser dissipado, resultando em menor eficiência de combustão (CASTIÑERA, 2006), conforme mostra a Tabela 29. As menores eficiências de combustão também podem ser devido à remoção e diluição de parte da corrente de combustível antes de encontrar uma fonte de ignição para iniciar sua reação, conforme discutido por Johnson e Kostiuk (2000).

Da análise conjunta da Tabela 29 e da Figura 39, nota-se também que a temperatura da chama diminui com o aumento da velocidade do vento, onde a chama tem menos capacidade de converter H₂S em SO₂, isso também diminui a eficiência da combustão e aumenta o H₂S ao redor da tocha.

Outro pseudoparâmetro que sofre impacto é a altura de liberação de H₂S bruto, onde há redução à medida que a velocidade do vento aumenta, com maiores chances de uma pluma de H₂S em maior concentração atingir o solo. As Figura 40 e 41 fazem as comparações entre o Cenário operacional real *versus* o Cenário operacional ótimo, mostrando a morfologia e distribuição de temperatura na chama, respectivamente.





Figura 41 – Distribuição de temperatura obtida na simulação numérica A) Cenário operacional real B) Cenário operacional ótimo



Da análise conjunta da Tabela 29 e Figura 40, ao se aumentar a vazão de gás enviada para a tocha, tem-se também o aumento da velocidade de saída, o que torna a chama do Caso 7 menos susceptível ao vento.

Nota-se também um incremento no comprimento de chama (15,91 m), devido à maior vazão mássica (16.743 kg h⁻¹) enviada para a queima. A injeção de gás combustível e retirada de uma parcela de inerte no Caso 7 promove ainda o aumento do PCI do gás, estabilidade e aumento da temperatura de chama, logo, maior eficiência de conversão e emissão de gases brutos mais quentes.

No que diz respeito à altura de liberação de H₂S bruto, nesse caso, pelo maior momento de saída do gás, há também maior altura de liberação, favorecendo a dispersão.

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Como forma de avaliar o impacto da dispersão de H₂S no bem-estar da comunidade ao redor de uma refinaria de petróleo, várias alterações foram feitas no modelo AERMOD. Inicialmente, foi necessário obter os parâmetros virtuais para entrada no modelo, específicos para fonte tocha, levando em conta a ineficiência da queima e emissão de H₂S bruto. A posteriori, foi estabelecida uma relação "pico-média" para obter as concentrações médias para curto período (5 s), considerando a respiração humana.

Os resultados do modelo mostram que a PD pode atingir 41 % e GI aproximadamente de 3,0 UA em uma distância de até 3,5 km da tocha (concentração máxima absoluta) em operação normal; também mostrou que medidas operacionais, como a redução de inertes na corrente enviada para queima e a injeção de gás combustível de assistência, podem reduzir a DP em até 19% no ponto de máxima concentração (próximo à tocha).

O próximo passo foi fornecer uma estrutura hierárquica das principais medidas operacionais que influenciam as concentrações de H₂S no nível do solo e suas interações, através de *design* de experimentos. Foi observado que os principais parâmetros, em ordem de importância são: injeção de GC, aumento da temperatura do gás enviado para a queima e remoção de inerte.

Da análise, constatou-se que considerar os valores de concentração máxima absoluta para a tomada de decisão quanto a alterações operacionais, poderia levar a um aumento de emissão de gases da combustão, sendo, então, utilizadas ferramentas estatísticas, tais como percentis, capazes de melhor representar as concentrações de H₂S, na maior parte do tempo no *site* da refinaria.

Em seguida, mostrou-se que a utilização do percentil 99 representa melhor o transtorno causado ao público, apontando medidas operacionais pontuais (por exemplo, aumento do gás de assistência e/ou redução de inertes no fluxo do queimador e/ou aumento da temperatura do gás antes da combustão) em condições meteorológicas desfavoráveis de modo a prevenir reclamações. Isso é necessário para garantir um maior grau de bem-estar para as comunidades do entorno da refinaria, além de evitar custos adicionais (como assistência contínua de gás para queima).

A análise conjunta do *design* de experimentos com os percentis indica que a inclusão de um resfriador na UTAA e um aquecimento do gás enviado para a queima com aumento mínimo da vazão de GC, considerada nos testes, seria a melhor opção, corroborando com os aspectos de melhoria do bem-estar e custos financeiros mencionados no parágrafo anterior.

No que tange aos resultados obtidos com CFD, inicialmente vimos que o CFD pode ser aplicado para simular o comportamento de tochas industriais sob ação de ventos, definindo uma grade 3D precisa e utilizando um modelo de combustão correto. Em segundo lugar, as tendências obtidas concordam com evidências teóricas e observacionais para tochas industriais e com a planilha AER. Os resultados indicaram a tendência de aumento na ineficiência em maiores velocidades de vento e aumento da eficiência com o aumento da vazão e PCI do gás. Finalmente, esses modelos de simulação podem ser usados para potenciais estratégias de controle operacional na tentativa de aumentar a eficiência de tocha, manipulando o PCI dos gases, velocidade de saída do gás etc.

Outro aspecto importante desse trabalho foi evidenciar a inadequação das abordagens metodológicas para obtenção de parâmetros virtuais existente para modelagem de gás bruto em tochas. As metodologias existentes são genéricas, aplicáveis a todo tipo de indústria e configuração de tocha. Claramente, não são adequadas para tochas químicas, cuja temperatura do gás será sempre maior que o da temperatura ambiente.

Recomenda-se, portanto, para avaliação da dispersão de gás bruto em tochas, a metodologia do AER, a qual conserva fluxo de momento e fluxo de empuxo para obtenção dos parâmetros virtuais. Diferente das demais abordagens, conserva o momento em vez de atribuir arbitrariamente à tocha uma velocidade e, portanto, o fluxo de momento arbitrário. Seus algoritmos reduzem ao fluxo de empuxo clássico de Briggs usado pela U.S. EPA quando as suposições simplificadoras de que a pluma tem a mesma massa molar e calor específico do ar ambiente.

Ademais, sugere-se a atualização das metodologias voltadas para a dispersão de poluentes em tocha nos órgãos reguladores, considerando a dispersão de gases não queimados e as novas configurações de tocha dos dias presentes, com projetos cada vez mais robustos.

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como sugestão para trabalhos futuros, podem ser realizadas comparações entre as concentrações previstas e modeladas em tochas químicas, quando da entrada para manutenção de equipamentos de controle ambiental do bloco de enxofre em refinarias. Atenção deverá ser dada para a escolha dos valores médios de tempo, uma vez que os modelos são mais confiáveis para estimar concentrações médias de tempo mais longo do que para estimar concentrações de curto período em locais específicos (U.S.EPA, 2005).

As modelagens podem incluir diferentes condições operacionais, tais como taxas de liberação intermitente, bem como diferentes condições topográficas ou meteorológicas e até mesmo outros poluentes. Sugere-se também uma análise de sensibilidade dos pseudoparâmetros, identificando aquele com maior influência sobre a dispersão de poluentes não queimados na atmosfera.

No que diz respeito à modelagem CFD, sugere-se a aplicação de modelos de combustão mais avançados, aprimorando os modelos preditivos obtidos pela análise de imagens, investigar a validade dos modelos para outros gases combustíveis e inertes e desenvolvimento de estratégias para o controle de emissões em tochas.

REFERÊNCIAS

AATAMILA, M., et al. Odour annoyance and physical symptoms among residents living near waste treatment centers. *Environ. Res.* 111, p.164–170, 2011.

ALBERTA ENERGY REGULATOR (AER). *AERflare user guide:* a model for temporary flaring permits, non-routine flaring and routine flaring air dispersion modelling for sour gas facilities version 2.01. Calgary: Alberta Energy Regulator, 2014 (Draft, 2021). Versão regulatória atual da planilha:<http://aer.ca/rules-and-regulations/directives/directive-060>. Última versão atualizada da planilha:< http://zeltpsi.com/aertools.html>.

AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE (API). API RP 521: guide for pressure relief and depressuring systems, 1st Edition, September 1969.

AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE (API). *API standard 521: pressure-relieving and depressuring systems*. 6 ed. Washington: American Petroleum Institute, 2014. 260 p.

AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE (API). API standard 537: Flare details for general refinery and petrochemical service. 3rd ed. Washington: American Petroleum Institute, 2017.

AMOORE, J. E. *The Perception of Hydrogen Sulfide Odor in Relation to Setting an Ambient Standard*. Prepared for California Air Resources Board, 1985.

ANSYS Fluent Meshing User's Guide, 16.1 ed. ANSYS, Inc., Canonsburg, April, 2015.

ANSYS Fluent Meshing User's Guide, 19.1 ed. ANSYS, Inc., Canonsburg, April, 2018.

ANSYS fluent tutorial guide 2021 R1, January 2021 ANSYS, 2021.

ARSHAD, M. Investigating the effects of liquid droplets, turbulence, and flare stack dimensions on the combustion efficiency of the modeled flares in crosswind. Thesis (Master of Science) – Faculty of Graduate Studies and Research, Department of Mechanical Engineering, Edmonton, Alberta, 2004.

ARYA, S.P. *Air Pollution meteorology and dispersion*. Oxford University Press, New York, 1999.

ASSAEL, M. J.; KAKOSIMOS, K. E. *Fires, explosions, and toxic gas dispersions:* effects calculation and risk analysis. Boca Raton, FL: CRC Press, 2010.

BADER, A.; BAUKAL, C.; BUSSMAN, W. Selecting the proper flare systems. *Chemical Engineering Progress*, [S.I.], v. 107, n. 7, p. 45–50, July 2011.

BAGSTER D.F.; SCHUBACH, S. A. The prediction of jet-fire dimensions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 9(3), p. 241-245, May 1996.

BAHADORI, A. *Natural gas processing:* technology and engineering design. Oxford: Elsevier Science & Technology, 2014a.

BAHADORI, A. *Pollution control in oil, gas and chemical plants*. New York: Springer Cham Heidelberg, 2014b.

BALCARRAS, T. R. *Modelling and Analysis of Flare Stack Thermal Radiation on Offshore Oil and Gas Facilities.* 2020. 121 p. Thesis (Master) Department of Mechanical and Materials Engineering Queen's University – Master of Applied Science, Ontario, 2020.

BARON, T. Reactions in turbulent free jets. The turbulent diffusion flame. *Chemical Engineering Progress*, v. 50 (2), p. 73–6, 1954.

BASTOS, A. B. et al. Gestão de gases ácidos nas refinarias da Petrobras com foco em redução de emissões atmosféricas. In: CONGRESSO NACIONAL DE ENGENHARIA DE PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS,1, Campina Grande, 2015.

BEYCHOK, M.R. *Fundamentals of Stack Gas Dispersion*, 3rd Edition. Irvine, CA: Milton R. Beychok, 1994.

BEYCHOK, M. R. *Fundamentals of Stack Gas Dispersion*, Newport Beach: Beychok, 2005.

BIRD, B. R.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Fenômenos de transporte*. 2^a Edição. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

BISWAS, R.; STRAWN, R. C. Tetrahedral and hexahedral mesh adaptation for CFD problems. *Applied Numerical Mathematics,* v.26, n. 1-2, p.135-151, 1998.

BOEKER, P. Odour Dispersion and fluctuation modelling with a non-stationary lagrangian Model. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON HARMONISATION WITHIN ATMOSPHERIC DISPERSION MODELLING FOR REGULATORY PURPOSES, 7., Belgirate, Italia, 28-31 May 2001. Disponível em: <http://rtmod.jrc.it/~thunis/harmo7/P212.pdf. Acesso em 4 ago. 2020.

BAGSTER, D.F.; SCHUBACH, S. A. The prediction of jet-fire dimensions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 9(3), p. 241-245, May 1996.

BAILLIE, S. et al. A Phenomenological Model for Predicting the Thermal Loading to a Cylindrical Vessel Impacted by High Pressure Natural Gas Jet Fires. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 76, p, 3-13, 1998.

BRANCHER, M. et al. A review of odour impact criteria in selected countries around the world, *Chemosphere*, v. 168, p.1531-1570, 2017.

BRANCO, N. N. Estudo analítico do mecanismo de blowout de chamas de difusão turbulenta. 2014.165 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Mecânica, São Paulo, 2014.

BRIGGS, G. A. Plume rise and buoyancy effects. In: ATMOSPHERIC SCIENCE AND POWER PREDICTION, Chapter 8, ed. D. Randerson, p. 317–66. Springfield, 1984.

BRIGGS, G.A. *Plume Rise*. USAEC Critical Review Series, TID-25075, National Technical Information Service, Springfield, Virginia, 1969.

BRITO, C. et al. *Material do Curso de Tratamento de Águas Ácidas*, Universidade Petrobras, 2011.

BRZUSTOWSKI, T. A. A model for predicting the shapes and lengths of turbulent diffusion flames over elevated industrial flares. In: CANADIAN CHEMICAL ENGINEERING CONFERENCE, 22., Toronto, 17- 22 Sept., p. 605-606, 1972.

BRZUSTOWSKI, T. A. Flaring in the energy industry. *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 2, Issue 3, p. 129-141,1976.

BRZUSTOWSKI, T. A; SOMMER Jr., E.C. Predicting radiant heating from flares. Proceedings – Division of Refining, v.53, API, Washington, DC, p.865-983, 1973.

CAMERON, I.; RAMAN, R. *Process systems risk management*. 1st edition, Vol. 6. Elsevier Academic Press: NY, 2005.

CANADIAN ASSOCIATION OF PETROLEUM PRODUCERS (CAPP). *Framework: sour non-routine flaring*. Alberta: CAPP, 2013. Disponível em: https://www.capp.ca/~/media/capp/customer-portal/publications/237189.pdf. Acesso em: 13 de nov. de 2018.

CAPELLI L et al. *Compilation of good practices in odour pollution*, D-NOSES, H2020-SwafS-23-2017-789315, 2020.

CAPELLI, L. et al. Measuring odours in the environment vs. dispersion modelling: a review. *Atmospheric Environment*, v. 79, p. 731-743, 2013.

CASTIÑEIRA, D. A Computational fluid dynamics simulation model for flare analysis and control. 2006. 244 p. Dissertation (Doctor of philosophy) - University of Texas at Austin, 2006.

CASTIÑEIRA, D.; EDGAR, T. CFD for simulation of crosswind on the efficiency of high Momentum jet turbulent combustion flames, *Journal of Environmental Engineering*, v. 134, n. 7, July 2008a.

CASTIÑEIRA, D.; EDGAR, T. Computational Fluid Dynamics for Simulation of Wind-Tunnel Experiments on Flare Combustion Systems, *Energy & Fuels*, v. 22, n. 3, 2008b.
CAZALBOU, J.B., SPALART, P.R., BRADSHAW, P. On the Behavior of 2-Equation Models at the Edge of a Turbulent Region. *Physics of Fluids*, Vol. 6, n^o. 5, p. 1797-1804, 1993.

CENTENO, F. R. et al. Comparison of different WSGG correlations in the computation of thermal radiation in a 2D axisymmetric turbulent non-premixed methane-air flame, *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, vol. 35, p. 419-430, 2013.

CHAMBERLAIN, G. A. Developments in design methods for predicting thermal radiation from flares. *Chemical Engineering Research and Design*, v.65, p. 299–309, 1987.

CHEN, J.-Y.; KOLLMANN, W. PDF modeling and analysis of thermal NO formation in turbulent nonpremixed hydrogen-air jet flames. *Combust. Flame*, 88, p.397–412, 1992.

CONCAWE. Odour management guidance for refineries. Report nº. 1/20, January 2020. Disponível em: < https://www.concawe.eu/wp-content/uploads/Rpt_20-1.pdf>. Acesso em: 19 jul. 2021.

COOK, J.; BAHRAMI, Z.; WHITEHOUSE, R. J. A comprehensive program for the calculation of flame radiation levels, Loss *Prevention in Process Industries*, Vol. 3, January 1990.

COOPER, C. D. et al. Odor investigation and control at a WWTP in orange county, Florida. *Environmental Progress*, v. 20, Issue 3, p.133–143, 2001.

COMMITTEE FOR THE PREVENTION OF DISASTER PUBLICATION 14E (CPR 14E). *Methods for the calculations of physical effects* – due releases of hazardous materials (liquids and gases) – The Yellow Book. 3rd ed. The Hague: C. J. H. van den Bosh, R. A. P. M. Weterings, 2005, 451p.

CONTI, C., GUARINO, M., BACENETTI, J. Measurements techniques and models to assess odor annoyance: a review. *Environ. Int.* 134, p.105-261, 2020.

COWLEY, L. T.; JOHNSON, A. D. Oil and gas fires: characteristics and impact, OTI 92 597. HMSO: London, 1992.

DAMUCHALI, A.M.; GUO, H. Evaluation of odour properties, their relationships, and impact of an oil refinery plant on the surrounding environment using field measurements. *Atmos. Environ.* 23, 2020.

DAVIES, M. J. E.; LEAHEY, D. M. *Field study of plume rise and thermal radiation from sour gas flares*. Alberta Environment and Alberta Energy Resources Conservation Board, June 1981.

DEPARTMENT FOR ENVIRONMENT, FOOD AND RURAL AFFAIRS (DEFRA). Odour Guidance for Local Authorities. London: DEFRA, 2010. DREW, G. H. et al. Appropriateness of selecting different averaging times fomodelling chronic and acute exposure to environmental odours. *Atmospheric Environment*, 41(13), p. 2870–2880, 2007.

DIETZ, A. C. Modelagem e simulação de reatores de Hidrotratamento (HDT) de correntes de diesel. 2014. 95 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2014.

DOSE, B. *CFD Simulations of a 2.5 MW wind turbine using ANSYS CFX and OpenFOAM.* 149 f. Thesis (Master Thesis) – Faculty of Computer Science and Electrical Engineering, University of Applied Science Kiel, Oldenburg, 2013.

DOURADO, H. O. Estudo da dispersão de gases odorantes ao redor de obstáculos através do modelo de pluma flutuante. 2007. 105 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2007.

DRAVNIEKS, A.; JARKE, F. (1980) Odor Threshold Measurement by Dynamic Olfactometry: Significant Operational Variables, *Journal of the Air Pollution Control Association*, 30:12, P.1284-1289, 1980.

ECHEKKI, T.; MASTORAKOS, E. *Turbulent Combustion Modelling:* Advances, New Trends and Perspectives. Springer, 2011.

FAIRWEATHER, M.; JONES, W.P.; LINDSTEDT, R.P. Predictions of radiative transfer from a turbulent reacting jet in a cross-wind. *Combust Flame*, v.89, p. 45-63. 1992.

FIUZA, G. C. C.; REZENDE, A. L. T. Comparação entre modelos de turbulência K- ω aplicados em um escoamento em canal com junção T. *Revista Militar De Ciência E Tecnologia*, *36*(4), 2020.

FREEMAN, T.; CUDMORE, R. *Review of odour management in New Zealand*. Wellington: Ministry for the Environment, Air Quality Technical Report 24, 2002.

FURIMSKY, E. Review: selection of catalysts and reactors for hydroprocessing. *Applied Catalysis*, v. 171, p. 177-206, July 1998.

GANDHI, S.; CHUNG, W.; NANGIA, K. *Designing for sulphur removal and storage:* part 1, Petroleum Technology Quarterly, Q2 2010.

GLASSMAN, I. Combustion. Academic Press Inc., New York, U.S.A, 1977. GOMES, E. G. Dispersão de Gases Inflamáveis em Unidades de Processamento de Petróleo: Avaliação do Posicionamento de Detectores por Fluidodinâmica Computacional. Dissertação de mestrado, Escola de Quimica da Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ, Rio de Janeiro, julho 2012.

GUIMARÃES, E. M. Causas e formas de corrosão na Unidade de Recuperação de

Enxofre da Refinaria Gabriel Passos (REGAP/PETROBRAS).2006. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais, Universidade Federal de Minas Gerais, Minas Gerais, 2006.

HANNA, S.R.; CHANG, J.C. Use of the Kit Fox field data to analyze dense gas dispersion modelling issues. *Atmospheric Environment,* v. 35, p. 2231–2242, 2001.

HANNA, S.R. et al. Evaluation of the ADMS, AERMOD and ISC3 dispersion models with de Optex, Duke, Forest, Kinkaid, Indianapolis and Lovett Field data sets. *International Journal of Environment and Pollution*, v. 16, n. 1-6, p. 301-314, 2001.

HANKINSON, G.; LOWESMITH, B.J. A consideration of methods of determining the radiative characteristics of jet fires. *Combustion and Flame*, 159 (3), p. 1165 – 1177, 2012.

HAWTHORNE, W.R.; WEDDELL, D.S.; HOTTEL, H. C. Mixing and combustion in turbulent gas jets. In: *Symposium on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena*, Williams & Wilkins, Baltimore, USA, 1949.

HEMMINKI, K.; NIEMI, M. L. Community study of spontaneous abortions: Relation to occupation and air pollution by sulfur dioxide, hydrogen sulfide, and carbon disulfide. *International Archives of Occupational and Environmental Health*, v. 51, Issue 1, p. 55–63, 1982.

HENSHAW, P.; NICELL, J. A.; SIKDAR, A. Parameters for the assessment of odor impacts on communities. *Atmospheric Environment*, 40(6), p.1016–1029, 2006.

HOSTE, M. et al. Characterization of the eddy dissipation model for the analysis of hydrogen-fuelled scramjets. *The Aeronautical Journal*, v. 123, Issue 1262, p. 536 – 565, 2019.

HUANG, R. F.; SAVAS, O.; GOUAHALLI, S. R. Flow Field in the Near Burner Region of a Partially Lifted Turbulent Gas Jet Flame in Cross Flow. In: *CHO, P. and QUINTIERE, J., editors, Heat and Mas Tbansfer in Fire and Combustion Systems*, v. 223 of HTD, p.105-110, The Winter Annual Meeting of the ASME. The American Society of Mechanical Engineers, 1992.

HUDON, G.; GUY, C.; HERMIA, J. Measurement of odor intensity by an electronic nose. *Journal of the Air and Waste Management Association,* 50, p.1750–1758, 2000.

HUTCHINSON, M.; OH, H.; CHEN, W. H. A review of source term estimation methods for atmospheric dispersion events using static or mobile sensors. *Information Fusion*. Elsevier B.V., v. 36, p. 130–148, 2017.

INTERNATIONAL ORGANIZATION FOR STANDARDIZATION (ISO). 10156: 2017: *Gas cylinders - gases and gas mixtures -* determination of fire potential and oxidizing ability for the selection of cylinder valve outlets, Geneva, 2017.

IOWA DEPARTMENT OF NATURAL RESOURCES (IDNR). *Modeling flare*. DNR: 2018. Disponível em: < https://www.iowadnr.gov/Environmental-Protection/Air-Quality/Modeling/Dispersion

Modeling?utm_medium=email&utm_source=govdelivery#249517-sourcecharacterization-guidancetools>. Acesso em: 04 de set. 2019.

JOHNSON, M. R.; KOSTIUK, L. W. A parametric model for the efficiency of a flare in crosswind. *Proceedings of the Combustion Institute*, v. *29,* Issue 2, p. 1943–1950, 2002.

JOHNSON, M. R.; KOSTIUK, L. W. Efficiencies of low-momentum jet diffusion flames in crosswinds. *Combustion and Flame*, v. 123, Issue 1–2, p.189–200, 2000.

KALGHATGI, G.T. Lift-off heights and visible lengths of vertical turbulent jet diffusion flames in still air. *Combustion Science and Technology*, v. 41, p. 17-29, 1984.

KALGHATGI, G. T. The Visible Shape and Size of a Turbulent Hydrocarbon Jet Diffusion Flame in a Cross-wind. *Comb. and Flame,* 1983, v. 52, p. 91-106, 1983.

KARAGEORGOS, P. et al. Characterization and dispersion modeling of odors from a piggery facility. *Journal of Environment Quality*, v.39, Issue 6, p. 2170-2178, Nov. 2010.

KAWANO, M. Desenvolvimento, validação e aplicação de um modelo matemático para dispersão de poluentes atmosféricos. 2003. 121 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2003.

KIM, H.K. Studies on combustion characteristics and flame length of turbulent oxyfuel flames. *Energy Fuel.*, v. 21, p. 1459–1467, 2007.

KNUST, C. M. Análise de superfícies de resposta para projeto de unidades de tratamento de águas ácidas. 2013. 165 p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2013.

KOSTIUK, L. W.; JOHNSON, M. R.; THOMAS, G. M.R. University Of Alberta Flare Research Project: final report November 1996 - September 2004. 2. ed. Disponível em: http://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:36034943. Acesso em: 08 ago. 2019.

LATOS, M. et al. Dispersion modeling of odours emitted from pig farms: Winterspring measurements. In: GLOBAL NEST JOURNAL, v. 12, p. 46–53, 2010.

LATOS, M. et al. Dispersion of Odorous Gaseous Compounds Emitted from Wastewater Treatment Plants. *Water Air Soil Pollut*, v. 215, p.667–677, 2011.

LAURSEN, J. K.; KARAVANOV, A. N. Processes for sulfur recovery, regeneration of spent acid, and reduction of NOx emissions. *Chemical and Petroleum Engineering*. v. 42 (5–6), p. 229–234, 2006.

LEAHEY, D.M. et al. *A Preliminary Study of the Chemical Composition and Combustion Efficiency of a Sour Gas Flare*; Alberta Environment, Research Management Division Report 85/30: Edmonton, Alberta, Canada, 1985.

LEAHEY, D. M.; STROSHER, M.B. Observations and predictions of jet diffusion flame behavior. *Atmospheric Environment*, v. 21, n. 4, p. 777-784, 1987.

LEAHEY, D. M.; DAVIES, M. J. E. Observations of plume rise from sour gas flares. *Atmospheric Environment*, v. 18, n. 5, p. 917-922, 1984.

LEAHEY, D. M.; PRESTON, K; STROSHER, M. Theoretical and observational assessments of flare efficiencies. *Journal of the Air & Waste Management Association*, v. 51, p. 1610-1616, Dec. 2001.

LE CLOIREC, P. et al. Sources of Volatile Organic Compounds and Study of Odorous Pollution. In: MARTIN, G.; LAFFORT, P. (Eds.). Odors and deodorization in the environment. New York: VCH Publishers. Cap. 8, p. 213-264, 1994.

LEE, et al. Evaluation of concentrations and source contribution of PM₁₀ and SO₂ emitted from industrial complexes in Ulsan, Korea: interfacing of the WRF–CALPUFF modeling tools. *Atmos. Pollut. Res.*, v.5, p.664–676, 2014.

LEONARDOS, G.; KENDALL, D.; BARNARD, N. Odor threshold determinations of 53 odorant chemicals. *Journal of the Air Pollution Control Association*, *19* (2), p. 91–95, 1969.

LEVY, J. I. et al. Using CALPUFF to evaluate the impacts of power plant emissions in Illinois: Model sensitivity and implications. *Atmos. Environ.*, 36; p.1063-1075, 2002.

LING, A. L. *Flare selection a sizing (engineering design guideline)*. Johor Bahru: KLM Technology Group, 2007.

MANNAN, S (Ed.). Lees' Loss prevention in the process Industries. 4th Edition. San Diego: Butterworth-Heinemann, 2012.

MCGINLEY, C. M.; MCGINLEY; M. A. Odor testing biosolids for decision making. In: ANNUAL RESIDUALS AND BIOSOLIDS MANAGEMENT CONFERENCE: PRIVATIZATION, INNOVATION AND OPTIMIZATION: HOW TO DO MORE FOR LESS, 16., 2002, Austin. *Proceedings...* Alexandria, VA: Water Environment Federation, 2002.

MCINTYRE, A. Application of dispersion modeling to odour assessment: a practical tool or a complex trap. *Water Science and Technology*, 41(6), p. 81–88, 2000.

MEDEIROS, A. Bases metodológicas para incorporação da variável ambiental no planejamento da expansão termoelétrica no Brasil. 2003. 126 f. Dissertação (Mestrado em Ciências em Planejamento Energético) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2003.

MEDEROS, F. S. et al. Dynamic modeling and simulation of catalytic hydrotreating reactors. *Energy & Fuels,* v. 20, n. 3, p. 936-945, April 2006.

MEI, Z. et al. Dimensions of CH₄-Jet Flame in Hot O₂/CO₂ Coflow. *Energy Fuels* v. 26, p. 3257–3266, 2012.

MENTER, F. R. Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. *AIAA Journal*, v. 32, nº. 8, p. 1598-1605, 1994.

MILHAU, A.; HAMELIN, M.; TATRY, V. Regulations Concerning Odors. In: MARTIN, Guy; LAFFORT, Paul (Eds.). Odors and deodorization in the environment. New York: VCH Publishers, Cap. 15, p. 445-463, 1994.

MILLER, D.; JUNG, S.; LUTOSTANSKY, E. Applicability of currently available flare radiation models for hydrogen and Syngas. *Process Safety Progress*, v.34, p. 141-146, June, 2014.

MINISTRY FOR THE ENVIRONMENT. *Good Practice Guide for Assessing and Managing Odour*. Wellington: Ministry for the Environment, New Zealand, 2016.

MOHAN, M.; SIDDIQUI, T.A. Analysis of various schemes for the estimation of atmospheric stability classification. *Atmospheric Environment*, v. 32, n. 21: p. 3775-3781, 1998.

MOLNARNE, M.; MIZSEYM, P.; SCHRÖDER, V. Flammability of gas mixtures. Part 2: influence of inert gases. *Journal of Hazardous Materials*. 121:1-3, 45-9, 2005.

MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. *Ambiente & Sociedade*, v.7, p. 159–172, 2004.

NATIONAL RESEARCH COUNCIL COMMITTEE ON ODORS. Odors from Stationary and Mobile Sources. Board on Toxicology and Environmental Hazards, Assembly of Life Sciences. National Research Council, National Academy of Sciences, Washington, DC, 1979.

NICELL, J. A. Assessment and regulation of odour impacts. *Atmospheric Environment*, v. 43, Issue 1, p. 196-206, 2009.

NICELL, J. A. Expressions to relate population responses to odor concentration. *Atmospheric Environment*, *37*(35), p.4955–4964, 2003.

NUNES, G. A. L. Estudo e análise da dispersão de poluentes: um estudo de caso para a cidade de Rio Grande do Sul. 2013. 120 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Universidade Federal do Rio Grande, Rio Grande, 2013.

NIMMERMARK, S. Influence of odour concentration and individual odour thresholds on the hedonic tone of odour from animal production. *Biosyst. Eng.* 108, p. 211–219, 2011.

NATIONAL INSTITUTE FOR PUBLIC HEALH AND THE ENVIRONMENT (RMVI). Assessment of odour annoyance in chemical emergency management, 2009. RIVM Report 609200001/2009.

NORTH DAKOTA DEPARTMENT OF ENVIRONMENTAL QUALITY (NDDEQ). Model input parameters for flares. Division of Air Quality, November 2010.

ODGAARD, E. *Characteristics of hydrocarbon fires in open-air*. Report no. 82- 0704, Det Norske Veritas. Norway: Research Division, Hoevik, 1983.

OHIO ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (OEPA). *Engineering guide #69*: Air dispersion modeling guidance. Division of Air Pollution Control. Ohio: OEPA, 2018.

OKLAHOMA DEPARTMENT OF ENVIRONMENTAL QUALITY (ODEQ). Air dispersion modeling guidelines for Oklahoma air quality permits. Oklahoma: ODEQ, June 2017. Acesso em: 08 de março de 2018. Disponível em: <https://www.deq.ok.gov/wp-content/uploads/airdivision/PG_Air_Dispersion_Modeling_Guidance.pdf>.

ONTARIO MINISTRY OF THE ENVIRONMENT (MOE). *Technical Bulletin-Modelling Open Flares under O. Reg. 419/05.* (Draft 2020).

PALACIOS, A.; MUÑOZ, M.; CASAL, J. Jet Fires: An experimental study of the main geometrical features of the flame in subsonic and sonic regimes, *AIChEJ*. v. 55, p. 256-263, 2009.

PALACIOS, A. et al. Thermal radiation from vertical jet fires. *Fire Saf. J.*, vol. 51, p. 93–101, Jul. 2012.

PARKASH, S. Refining process handbook. 1st Edition. Elsevier, 2003.

PASQUILL, F. *Atmospheric Diffusion*. D. Van Nostrand Company Ltd. Princeton, New Jersey, 1962.

PASQUILL. F. The Estimation of the dispersion of windborne material. *Meteorological Magazine*, v. 90, p. 33-49, 1961.

PERISSÉ, J. B. *Evolução do refino de petróleo no Brasil*. 2007. 101 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007.

PETROBRAS. *Processos de refino*. Curitiba, 2002 (Apostila do Curso de Formação de Operadores de Refinaria).

PFLUCK, C.E.F. Simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes na atmosfera. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2010. PICCARDO, M.T et al. Odor emissions: a public health concern for health risk perception, *Environmental Research*, v. 204, Part B, 2022,112121.

PIRINGER, M. et al. A sensitivity study of separation distances calculated with the Austrian Odour Dispersion Model (AODM). *Atmospheric Environment*, 41(8), p.1725–1735, 2007.

PITSCH, H.;PETERS, N. A Consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combust. Flame* v.114, p.26–40, 1998.

PITSCH, H.; CHEN, M.; PETERS, N. Unsteady flamelet modeling of turbulent of hydrogen-air diffusion flames. In: TWENTY-SEVENTH SYMPOSIUM (INTERNATIONAL) ON COMBUSTION/THE COMBUSTION INSTITUTE, pp. 1057–1064, 1998.

PROTIM - Banco de Dados Meteorológicos. (n.d.). Retrieved May 4, 2022, from http://bancodedados.cptec.inpe.br/downloadBDM/

QUINLAN, M.; HATI, A. Processing NH₃ acid gas in sulphur recovery unit, *Gas*, p.45-55, Apr. 2010.

RAHNAMA, K.; DE VISSCHER, A. Simplified Flare Combustion Model for Flare Plume Rise Calculations. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 94, p. 1249-1261. July 2016.

RANA, M. S. et al. A review of recent advances on process Technologies for upgrading of heavy oils and residua. *Fuel*, v.86, p. 1216-1231, June 2007.

REIS, L.C.B.S. et al. Numerical modeling of flow through an industrial burner orifice. *Applied Thermal Engineering*, v. 67, Issues 1–2, p. 201-213, 2014.

RILEY, K. F.; HOBSON, M. P.; BENCE, S. Mathematical Methods for Physics and Engineering, 3rd Edition, 2006.

SCHAUBERGER, G.; PIRINGER, M. Assessment of separation distances to avoid odour annoyance: interaction between odour impact criteria and peak-to-mean factors. *Chemical Engineering Transactions*, Milano, v. 30, 2012.

SCHWEITZER, J.; LOPEZ-GARCIA, C.; FERRE, D. In-depth modeling of gas oil hydrotreating: from feedstock reconstruction to reactor stability analysis. *Catalysis Today*, v.150, p. 279-299, Mar 2010.

SCIRE, J. S.; STRIMAITIS, D. G.; YAMARTINO, R. J. A User's Guide for the CALPUFF Dispersion Model (Version 5). Earth Tech Inc, Concord, 2000.

SHANG, F. et al. A. Flame downwash length evolution of non-premixed gaseous fuel jets in crossflow: Experiments and a new correlation. *Applied energy*, v. 198, p. 99-107, Apr. 2017.

SENGUPTA, A. *Modeling of jet diffusion flame in gas flare system.* 2010. 99 p. Dissertation (Master of Technology in Chemical Engineering). Department of Chemical Engineering Indian Institute of Technology Roorkee, 2010.

SENGUPTA, A. et al. One Dimensional Modeling of Jet Diffusion Flame. *J. appl. res. technol*, Cidade do México, v. 16, n. 4, p. 320-333, 2018.

SERVIÇO NACIONAL DE APRENDIZAGEM INDUSTRIAL (SENAI). Fundamentos da instrumentação: Analítica processos industriais válvulas. São Paulo: SENAI-SP Editora, 2015.

SHERIDAN, B. Odour and bioaerosol impact assessment of the Littleton Recycling Facility to be located in Littleton, Co. Tipperary. Dublin: Odour & Environmental Engineering Consultants, 2008.

SHORE, D. Making the flare safe. J. Loss Prev. Process Ind. v.9, nº 6, p. 363-381, 1996.

SINGH, K.D. et al. Computational fluid dynamics modeling of industrial flares operated in a stand-by mode. Ind. *Eng. Chem. Res.* V.51(39), p. 12611–12620, 2012.

SINGH, K. D. et al. Computational fluid dynamics modeling of laboratoryflames and an industrial flare, *Journal of the Air & Waste Management Association*, v. 64, p.1328-1340, 2014.

SMITH, P. J. et al. *Large eddy simulation of industrial flares*. SC'11 Companion, November 12–18, Seattle, WA. ACM 978-1-4503-1030-7/11/11, 2011.

SMITH, J. D.; SUO-AHTTILA, P.; JACKSON, R. Prediction of plume formation and dispersion from gas flares. In: ANNUAL AMERICAN FLAME RESEARCH COMMITTEE MEETING. SALT LAKE CITY, p. 1–13, 2012.

SONI, A.; PARMAR, N. Flare radiation mitigation analysis of onshore oil & gas production & refining facility for a low cost de-bottlenecking using computer aided techniques. *International Journal of Scientific & Engineering Research*, v. 9, Issue 2, p. 975-982, 2018.

SONJU, O.K.; HUSTAD, J. *An experimental study of turbulent jet diffusion flames*, Norweg Marit, Res. 4, p. 2-11, 1984.

STEWART, M. Surface Production Operations, Gulf Professional Publishing, p. 549-638, 2016.

STROSHER, M. T. Characterization of emissions from diffusion flare systems. *Journal of the Air & Waste Management Association*, v.50, Issue 10, p.1723-1733, Oct. 2000.

STROSHER, M.T. *Investigations of flare gas emissions in Alberta*. Alberta: Environmental Technologies, 1996. Report final. Disponível em: <https://ags.aer.ca/document/SPE/SPE_005.pdf>. Acesso em: 24 de set. de 2017. STUETZ, R. M.; GOSTELOW, P.; BURGESS, J. E. Odour perception. In: STUETZ, R.; FRECHEN, F. (Eds.). *Odour in Wastewater Treatment:* Measurement, Modelling and Control. London: IWA Publishing, Cap. 1, p. 3-15, 2001.

STULL, R. B. *Meteorology for scientists and engineers.* 2nd edition. California: Brokes/Cole, Cengage Learning, 502 p, 2000.

TARTAKOVSKY, D., BRODAY, D.M., STERN, E. Evaluation of AERMOD and CALPUFF for predicting ambient concentrations of total suspended particulate matter (TSP) emissions from a quarry in complex terrain. *Environ Pollut.* 179, p. 138–145, 2013.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J. L. *A first course in turbulence*. Cambridge, MA: The MIT press, 1972.

TEXAS COMMISSION ON ENVIRONMENTAL QUALITY (TCEQ). *Air Quality Modeling Guidelines APDG (6232)*. Air Permits Division. TCEQ, November 2019.

TEXAS COMMISSION ON ENVIRONMENTAL QUALITY (TCEQ). *Technical basis for flare parameter (memorandum) APD Technical Staff*. TCEQ: 2004. Disponível em: <

https://www.tceq.texas.gov/assets/public/permitting/air/memos/flareparameters.pdf>. Acesso em: 14 maio 2017.

TURNER, D.B. *Workbook of atmospheric dispersion estimates*: an introduction to dispersion modeling. 2nd Edition, CRC Press, Boca Raton, 1994.

TURNS, R. S. *An introduction on combustion*. 2nd ed. New Delhi: McGraw-Hill Higher Education, 2000.

TYLISZCZAK, A. LES-CMC & LES-flamelet simulation of non-premixed methane flame (Sandia F). J. Theor. Appl. Mech. v.51, p. 859–871, 2013.

UK ENVIRONMENT AGENCY. *Draft Horizontal Guidance for Odour* Part 2: Assessment and Control. Bristol: Environment Agency, 2002. Technical Guidance Note IPPC H4.

UNITED STATES CODE OF FEDERAL REGULATIONS. *40 CFR Part 60 and 63.* National emission standards for hazardous air pollutants and new source performance standards: Petroleum Refinery Sector Amendments. Federal Register / Vol. 83, N° 227 / Monday, November 26, 2018 / Final Rule.

UNITED STATES CODE OF FEDERAL REGULATIONS. 40 CFR Appendix W to Part 51, Guideline on Air Quality Models, 2005.

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (USEPA). A comparison of CALPUFF and ISC3. Research Triangle Park: North Carolina. Report n° EPA-454/R-98-020, Dec 1998.

_____. AERMOD Model Formulation and Evaluation Document. Research Triangle Park: North Carolina. EPA-454/B-21-003, April 2021.

_____. AP 42. 5th ed. Compilation of Air Pollutant Emission Factors, Volume 1: Stationary Point and Area Sources, CH 13: *Miscellaneous Sources*, 1995a.

_____. Correspondence: Koerber-Wilson: Procedures for Modelling a Flare. 1986. Disponível em:

https://www3.epa.gov/ttn/scram/guidance/mch/new_mch/R396_KOERBER_6_OCT_86.pdf>. Acesso em: 13 ago. 2021.

_____. Cost Manual, Section 3 VOC Controls, Section 3.2 VOC Destruction Controls, Chapter 1 *Flares*. Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, NC. United States Environmental Protection Agency EPA/452/B-02-001. September 2000.

_____. *Parameters for properly designed and operated flares*. Washington, DC: USEPA Office of Air Quality Planning and Standards (OAQPS), 2012.

_____. Reference Guide to Odor Thresholds for Hazardous Air Pollutants Listed in the Clean Air Act Amendments of 1990. U.S. Environmental Protection Agency, Washington, D.C., 1992. EPA/600/R-92/047.

______. *Revision to the guideline on air quality models:* adoption of a preferred general purpose (flat and complex terrain) dispersion model and other revisions. Research Triangle Park: USEPA, 2005. v. 70, n. 216. Final Rule (Federal Register 40 CFR 51, Part III).

_____. User's guide for the AERMOD terrain preprocessor (AERMAP). EPA-454/B-03-003. 2004.

_____. User's guide for the Industrial Source Complex (ISC3) dispersion model, Volume II – Description of model algorithms. Report n° EPA PA-454/B-95-003b, Sep., 1995b.

_____. SCREEN3 Model User's Guide. Office of Air Quality Planning and Standards, September 1995c.

_____. Sulfur recovery. In: _____. *AP 42 emission factors*. 5th Edition, Volume I. Research Triangle Park: USEPA, 2015. Chapter 8, Inorganic Chemical Industry.

_____. Workbook of Screening Techniques For Assessing Impacts of Toxic Air Pollutants (Revised). EPA-454/R-92-024. U.S. Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, NC, 1992.

SCHNELLE, K. B.; DEY, P. R. *Atmospheric Dispersion Modeling Compliance Guide*. McGraw-Hill Professional, 1st Edition, p.560, 1999.

VERSTEEG, H.K.; MALALASEKERA, W. An introduction to computational fluid dynamics. 2nd ed. Essex, Pearson Prentice Hall, 2007.

VIANNA JR., A. S.; SIQUEIRA, F.; QUINTA, L.; LIMA, A. CFD e a defesa química. *Revista virtual de Química,* v. 6, Issue 2, p. 815-832, 2014.

VIEIRA, M. M. Abordagem de procedimentos legais para o controle de incômodos olfativos. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental). 2013. 191p. Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, 2013.

VISSCHER, A. Air dispersion modeling. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc., 2013.

VUJANOVIC, M.; DUIC, N.; TATSCHL. R. Validation of reduced mechanisms for nitrogen chemistry in numerical simulation of a turbulent non-premixed flame. *React. Kinetics Catal. Lett.*, v.96, p.125–138, 2009.

WADE, R.; GORE, J.P. Visible and chemical flame lengths of acetylene/air jet diffusion flame. *In: Annual Conference on Fire Research*: Book of Abstracts, National Institute of Standards and Technology, p. 41– 42, Gaithersburg, Maryland, USA, 1996.

WANG et al. Comparison of CALPUFF and ISCST3 model for predicting downwind odor and source emission rates. Atmospheric Environment, 40 (25), p. 4663-4669, 2006.

WANG, L.K.; LIN, W.; HUNG, Y.-T. Thermal oxidation. In: WANG. L.K.; PEREIRA, N.C.; HUNG, Y.T. *Air pollution control engineering*: handbook of environmental engineering. Totowa: Humana Press, 2004.

WANG, L.K, WILLIFORD, C.; CHEN, W.-Y. Flare process. In: WANG. L.K.; PEREIRA, N.C.; HUNG, Y.T. *Air pollution control engineering*: Handbook of environmental engineering. Totowa: Humana Press, 2004.

WHITE, J.; BUSSMAN, W. Flare Radiation, chapter 8, p. 207–225. CRC Press, 2012.

WICKSTRÖM, U. *Temperature calculation in fire safety engineering*. Luleå University of Technology. Switzerland: Springer Nature, 2016.

WILCOX, D. C. *Turbulence Modelling for CFD*. DCW Industries, INC. California 3rd edition, 2006.

WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO). Regional Office for Europe. *Air quality guidelines for Europe*, 2nd ed. World Health Organization. Regional Office for Europe, 2000.

Yu, Z. et al. Setting acceptable odour criteria using steady-state and annual hourly weather data. *Biosystems Engineering*, 103(3), p.329–337, 2009.

ZABETAKIS, M.G. *Flammability Characteristics of Combustible Gases and Vapors*. U.S. Bureau of Mines, Bulletin 627, 1965.

ZADAKBAR, O. et al. Risk analysis of flare flame-out condition in a gas process facility. *Oil and Gas Science and Technology*, v. 66, n. 3, p. 521–530, Jan. 2011.

ZAREI, T.; EZADI, A. A. Study on the flare tip of a gas refinery with various designs of windshields using CFD simulations. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 37, Issue 1, p. 227–236, 2020.

ZELENSKY, M.J.; ZELT, B. Pseudo-source parameters for flares: Derivation, implementation, and comparison, *Journal of the Air & Waste Management Association*, 69:4, p. 450-458, 2019.

ZHAO, F. *Inert gas dilution effect on flammability limits of hydrocarbon mixture*. 2011. 213 f. Dissertation (Doctor of Philosophy) – Chemical Engineering, Texas A&M University, Texas, 2011.

ZUCKERMAN, N.; LIOR, N. Jet impingement heat transfer: physics, correlations, and numerical modeling. v. 39, *Advances in Heat Transfer*, Elsevier, pp. 565 – 631, 2006.

WATTS, P.J.; SWEETEN, J.M. Toward a better regulatory model for odour. In: PROCEEDINGS OF THE FEEDLOT ASSOCIATION OF AUSTRALIA CONFERENCE, 10., Feedlot Waste Management Conference, Benowa, QLD, 1995.

WEBGIS - Free Terrain Data - Geographic Information Systems Resource - GIS. (n.d.). Disponível em:<http://www.webgis.com/srtm3.html>. Acesso em: 07 ago. 2021.