



**Universidade Estadual de Campinas**  
**Faculdade de Engenharia Química**

**Mateus Pereira Caixeta**

**Utilização da fluidodinâmica computacional para avaliar a influência dos parâmetros geométricos do hidrociclone na recuperação primária de hidratos de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> produzidos em um reator NETmix®**

Campinas

2019

**Mateus Pereira Caixeta**

**Utilização da fluidodinâmica computacional para avaliar a influência dos parâmetros geométricos do hidrociclone na recuperação primária de hidratos de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> produzidos em um reator NETmix®**

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Coorientador: Dr. Diener Volpin Ribeiro Fontoura

ESTE TRABALHO CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO MATEUS PEREIRA CAIXETA E ORIENTADA PELO PROFESSOR DR. JOSÉ ROBERTO NUNHEZ

Campinas

2019

Ficha catalográfica  
Universidade Estadual de Campinas  
Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura  
Elizangela Aparecida dos Santos Souza - CRB 8/8098

C124u Caixeta, Mateus Pereira, 1993-  
Utilização da fluidodinâmica computacional para avaliar a influência dos parâmetros geométricos do hidrociclone na recuperação primária de hidratos de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> produzidos em um reator NETmix / Mateus Pereira Caixeta. – Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: José Roberto Nunhez.  
Coorientador: Diener Volpin Ribeiro Fontoura.  
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Gas natural - Hidratos. 2. Hidratos. 3. Hidratos - Análise. 4. Fluidodinâmica computacional (CFD). 5. Extração sólido-líquido. 6. Interfaces sólido-líquido. I. Nunhez, José Roberto, 1961-. II. Fontoura, Diener Volpin Ribeiro. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Informações para Biblioteca Digital

**Título em outro idioma:** Computational fluid dynamics application to evaluate the influence of hydrocyclone geometrical parameters on the primary recovery of CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> hydrates produced in a NETmix reactor

**Palavras-chave em inglês:**

Natural gas - Hydrates

Hydrates

Hydrates - Analysis

Computational Fluid Dynamics (CFD)

Solid-liquid extraction

Solid-liquid interface

**Área de concentração:** Engenharia Química

**Titulação:** Mestre em Engenharia Química

**Banca examinadora:**

José Roberto Nunhez [Orientador]

Nicolas Spogis

Lucídio Cristóvão Fardelone

**Data de defesa:** 28-02-2019

**Programa de Pós-Graduação:** Engenharia Química

**Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)**

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0002-4382-3707>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/6009699512996487>

Folha de Aprovação da Dissertação de Mestrado defendida por Mateus Pereira Caixeta aprovada em 28 de fevereiro de 2019 pela banca examinadora constituída pelos seguintes doutores:

Prof. Dr. José Roberto Nunez  
FEQ / UNICAMP

Dr. Nicolas Spogis  
PUC-Campinas

Dr. Lucidio Cristovão Fardelône  
Universidade Estadual de Campinas

ATA da Defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

## **AGRADECIMENTOS**

Ao professor Dr. José Roberto Nunhez pela oportunidade de pesquisa e contribuição com meu desenvolvimento como pesquisador.

Aos Doutores Diener Volpin Ribeiro Fontoura e Lucídio Cristóvão Fardelone pelas orientações e dicas imprescindíveis ao meu desenvolvimento como profissional e pessoal.

As colegas e aos colegas de laboratório, Nayla, Aglaer, Maria, Alexandre, Luiza, Raphael, Edil, Isaque, Karla, Nicolao por me ajudarem nas duras rotinas de aprendizado.

A família e aos amigos por me darem suporte emocional e profissional nessa caminhada de estudos.

Ao CNPq pelo apoio financeiro através do processo 132483/2017-3 de bolsa de Mestrado, o qual demonstrou reconhecimento da importância do incentivo à minha pesquisa durante esses anos.

## RESUMO

Os hidratos de gases tem sido um grande problema nas indústrias de exploração e processamento de petróleo, pois a sua estrutura cristalina formada causa entupimento que pode levar a danos estruturais das tubulações que chegam nas profundezas do mar. Porém a comunidade científica vem pesquisando sobre esse sólido cristalino cada vez mais e tem-se descoberto um outro efeito completamente benéfico para os processos de gerenciamento de gases. Sua estrutura consegue capturar uma grande quantidade de gás, o que se torna interessante do ponto de vista de processos de armazenamento e transporte de gases em baixas temperaturas e pressões moderadas, evitando possíveis acidentes catastróficos nas estações de compressão de gasodutos, atualmente utilizados como meio de transporte de gases. O método mais usual de sintetização de hidratos de gases é via batelada em tanques de mistura a baixas temperaturas e altas pressões, porém esse método é ineficiente do ponto de vista da limitação da nucleação dos cristais de hidratos e da dificuldade de se arrefecer o processo, já que o mesmo é altamente exotérmico. Resolvendo esse gargalo, a tecnologia NETmix® patenteada pela Universidade do Porto, traz uma grande melhoria dos fenômenos de transporte de calor, massa e quantidade de movimento dos fluidos escoando em seu interior, aumentando assim sua eficiência de mistura e síntese dos hidratos. Porém, ainda há a presença de água e uma pequena fração de gases a serem separados do hidrato na saída do reator. Dessa maneira foi estudada a eficiência do hidrociclone na separação dos hidratos formados, assim como a influência dos parâmetros geométricos desse equipamento na recuperação dos hidratos. Foi utilizado a abordagem matemática multifásica Euler-Euler para descrever a dinâmica das fases, com o auxílio do modelo de turbulência RSM. O modelo fluidodinâmico proposto foi validado e mostrou ser adequado para simular o escoamento da suspensão água/hidrato. Foi observado nas simulações que a influência individual de cada parâmetro geométrico não alterou significativamente a performance de separação do hidrato por parte do hidrociclone, porém houve uma conformação geométrica específica em um dos hidrociclones simulados, na qual conseguiu concentrar a suspensão água/hidratos em 24.37% em massa.

## ABSTRACT

Gas hydrates have been a major problem in the oil exploration and processing industries because their crystalline structure causes clogging of pipes used to reach deep oil reservoirs. However, the scientific community has been increased its researching on this crystalline solid since its production may be a promising way to treat the gases stored in the marine wells. Its structure is able to capture a large amount of gas, which is interesting from the point of view of gas storage and transport processes at low temperatures and moderate pressures, avoiding possible catastrophic accidents in gas station compression stations, currently used as a means of transport of gases. The most common method of synthesizing gas hydrates is by batch in mixing tanks at low temperatures and high pressures, but this method is inefficient from the point of view of thermal exchange, since the process is highly exothermic. Experimental studies are being carried out with the use of NETmix®, patented technology by the Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, which brings a great improvement in the phenomena of heat transport, mass and momentum of the fluids within it, which increases the mixing efficiency and synthesis of gas hydrates. As there is in the process the presence of water and a small fraction of gases to be separated from the hydrate at the exit of the reactor, the efficiency of the hydrocyclone in the separation of the formed hydrates was studied, as well as the influence of the geometric parameters of this equipment in the hydrate recovery. The Euler-Euler multiphase mathematical approach was used to describe the dynamics of the phases, with the aid of the RSM turbulence model. The proposed fluid dynamics model was validated and shown to be adequate to simulate the flow of the water/hydrate suspension. It was observed in the simulations that the individual influence of each geometric parameter did not significantly improved the performance of the hydrocyclone to concentrate the hydrate suspension, but there was a specific geometric conformation in one of the simulated hydrocyclones, in which the water/hydrate suspension was concentrated in 24.37% w/w.

## LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Produção nacional de gás natural. MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA (2018). 21
- Figura 2 – Injeção de CO<sub>2</sub> para aumentar a eficiência de extração de petróleo. FILHO (2016). 23
- Figura 3 – Reator de mistura estática NETmix®, imagem em corte lateral das câmaras reacionais. FONTE *et. al.* (2012). 25
- Figura 4 – Bateria de hidrociclones em paralelo. AKW EQUIPAMENTOS E PROCESSOS (2019) 27
- Figura 5 – Desenho esquemático geral de um hidrociclone. AMARAL (2008). 27
- Figura 6 - Tipos de estruturas cristalinas dos hidratos. KOH e SLOAN (2007). 30
- Figura 7 – Condições de temperatura e pressão para a formação de alguns hidratos de gases comuns. (A) SLOAN e KOH (2007); (B) BAKKER e THIÉRY (1994). 32
- Figura 8 – Estrutura do NETmix®. FONTE *et. al.* (2012). 37
- Figura 9 – Comparação do fator Z entre o NETmix® e outros misturadores estáticos comerciais. FONTE *et. al.* (2012). 38
- Figura 10 – Eficiência de classificação para um hidrociclone. SVAROVSKY (2000) 42

Figura 11 – Conservação de massa (A) e momentum (B) dentro de um volume de controle infinitesimalmente pequeno. (A) Fluxos de massa no volume de controle. (B) Geração de tensão normal ao eixo ( $\sigma$ ) e tensão de cisalhamento ( $\tau$ ). TU *et. al.* (2013).

51

Figura 12 – Comparação entre experimental e simulação da separação de uma suspensão de água e calcário a 10,47 % em massa por um hidrociclone de 75 mm de diâmetro. COKLJAT *et. al.* (2006).

62

Figura 13: Comparação entre experimental e simulação da eficiência de classificação obtidos para o *underflow* e *overflow* do hidrociclone. RAZIYEH e ATAALLAH (2014).

63

Figura 14: Representação do tubo por onde escoia o sistema gás-sólido. TIAN *et. al.* (2005).

63

Figura 15: Comparação entre a abordagem Euleriana e Lagrangiana na predição da velocidade máxima negativa (normalizada com a velocidade de entrada) na zona de recirculação de partículas. TIAN *et. al.* (2005).

64

Figura 16 – Fatia cuja espessura é o valor de  $Y^+$ .

65

Figura 17 – Geometria e malha cfMesh do hidrociclone de validação.

77

Figura 18 – Linha de corte em arco-íris onde os dados de velocidade tangencial para a partícula de areia foram coletados.

84

Figura 19 – Comparação dos dados calculados com os dados da literatura.

85

Figura 20 – Magnitude da velocidade da fase dispersa (areia).

87

Figura 21 – Distribuição da pressão manométrica total.

88

Figura 22 – Distribuição da fração volumétrica da fase dispersa (areia)	89
Figura 23 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidratos ao longo do domínio de H1.	96
Figura 24 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidratos ao longo do domínio de H2.	97
Figura 25 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidratos ao longo do domínio de H3.	98
Figura 26 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidratos ao longo do domínio de H4.	99
Figura 27 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidratos ao longo do domínio de H5.	100
Figura 28 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidratos ao longo do domínio de H6.	101
Figura 29 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidratos ao longo do domínio de H7.	102
Figura 30 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidratos ao longo do domínio de H8.	103
Figura 31 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H1 respectivamente.	104
Figura 32 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H2 respectivamente.	104
Figura 33 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H3 respectivamente.	105

Figura 34 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H4 respectivamente. 106

Figura 35 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H5 respectivamente. 107

Figura 36 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H6 respectivamente. 108

Figura 37 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H7 respectivamente. 109

Figura 38 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H8 respectivamente. 110

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Média de consumo de gás natural no brasil em 2018. MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA (2018).	20
Tabela 2 – Intervalo de valores de $Y^+$ para cada modelo de turbulência.	66
Tabela 3 – Trabalhos que contém a modelagem semi-empírica dos termos do modelo RSM.	73
Tabela 4 – Geometria do hidrociclone para validação. AZIMIAN e BART (2016).	76
Tabela 5 – Parâmetros da Equação 49 para o hidrociclone descrito na Tabela 4.	79
Tabela 6 – Configuração das simulações através do FLUENT 17.2.	80
Tabela 7 – Planejamento fatorial $2^{4-1}$ para as variáveis de design do hidrociclone de separação água/hidrato.	81
Tabela 8 – Condições de contorno da separação água/hidrato.	82
Tabela 9 – Propriedades físicas dos componentes do sistema a 4 °C.	82
Tabela 10 – Recuperação mássica de areia ao longo do tempo.	86
Tabela 11 – Informações sobre as malhas de cada hidrociclone.	90
Tabela 12 – Dados sobre a separação da suspensão de hidrato para cada hidrociclone.	91
Tabela 13 – Estimativa do efeito das variáveis de design no valor de concentração de hidratos na descarga do <i>underflow</i> para o planejamento fatorial fracionário $2^{4-1}$ .	92

## LISTA DE SÍMBOLOS

$D; D_c$	Diâmetro do cilindro do hidrociclone	mm
$D_i$	Diâmetro de alimentação	mm
$D_o$	Diâmetro do <i>overflow</i>	mm
$D_u$	Diâmetro do <i>underflow</i>	mm
$L_{vf}$	Comprimento do <i>vortex finder</i>	mm
$L$	Comprimento do corpo do hidrociclone	mm
$h$	Comprimento do vórtice (tornado) livre	mm
$Q$	Vazão volumétrica de suspensão alimentada	L/min
$t$	Tempo	s
$n_{g,0}; n_{g,t}$	Número de mols de gás no instante 0 e t	(-)
$n_{A,t}$	Número de mols do gás A no instante t	(-)
$P_0; P_t$	Pressão de formação do hidrato no instante 0 e t	Pa
$V$	Volume	m <sup>3</sup>
$Z_0; Z_t$	Fator de compressibilidade do gás no instante 0 e t	(-)
$R$	Constante dos gases ideais	J/mol.K
$T$	Temperatura	K
$y_0; y_t$	Fração molar na fase gás no instante 0 e t	(-)
$E_T$	Eficiência total	(-)
$E'_T$	Eficiência total reduzida	(-)
$M_{o/u}$	Vazão mássica do <i>overflow</i> ou <i>underflow</i>	kg/s
$x_{o/u}$	Fração mássica de um componente no <i>overflow</i> ou <i>underflow</i>	kg
$M_i$	Vazão mássica do componente i na alimentação	kg/s
$x_i$	Fração mássica do componente i na alimentação	(-)
$G(x)$	Eficiência de classificação	(-)
$G'(x)$	Eficiência de classificação reduzida	(-)
$R_f$	Razão entre a vazão volumétrica eFluente e alimentada (diluída)	(-)
$M_c$	Vazão mássica eFluente	kg/s
$M$	Vazão mássica de alimentação	kg/s

$\frac{dF_c}{dx}$	Distribuição de frequência do sólido eFluente	(-)
$\frac{dF}{dx}$	Distribuição de frequência do sólido na alimentação	(-)
$\frac{dm}{dt}$	Taxa de acúmulo de massa	kg/s
$\dot{m}$	Vazão mássica	kg/s
$m$	Massa	kg
$\vec{F}$	Vetor força	N
$\frac{d\vec{u}}{dt}$	Variação do vetor velocidade com o tempo	m/s <sup>2</sup>
x, y, z	Coordenadas espaciais	m
$\vec{u}$	Vetor velocidade orientado pelo eixo x	m/s
$\vec{v}$	Vetor velocidade orientado pelo eixo y	m/s
$\vec{w}$	Vetor velocidade orientado pelo eixo z	m/s
P	Pressão	Pa
g	Aceleração da gravidade	m/s <sup>2</sup>
F <sub>D</sub>	Força de arrasto	N
F <sub>Dk</sub>	Força de arrasto sobre a fase ou componente k	N
S <sub>q</sub>	Termo fonte de massa para a fase q	kg/m <sup>3</sup> .s
$\dot{m}_{pq}$	Taxa de transferência da massa de p para q, por volume	kg/m <sup>3</sup> .s
$\dot{m}_{qp}$	Taxa de transferência da massa de q para p, por volume	kg/m <sup>3</sup> .s
$\vec{R}_{pq}$	Força de interação entre as fases ou componentes p e q	N/m <sup>3</sup>
$\vec{F}_{lift}$	Vetor da força de sustentação	N/m <sup>3</sup>
$\vec{F}_{vm}$	Vetor da força virtual mássica	N/m <sup>3</sup>
$\bar{I}$	<i>Momentum</i> de inércia	kg.m <sup>2</sup>
Re	Número de Reynolds	(-)
K <sub>pq</sub>	Coefficiente de troca de <i>momentum</i>	kg/m <sup>3</sup> .s
d	Diâmetro da fase dispersa	m
C <sub>l</sub> ; C' <sub>l</sub>	Coefficientes <i>lift</i>	(-)
f(Re <sub>p</sub> , Re <sub>ω</sub> )	Parâmetro da equação que descreve $\vec{F}_{lift}$	(-)
N	Número de ciclos de tempo	(-)

$\bar{u}$	Velocidade média	(-)
$u'; v'; w'$	Componentes de flutuação da velocidade nos eixos x, y, z	m/s
$C_{\mu}$	Constante empírica da viscosidade dinâmica turbulenta	(-)
$G_k; G_b$	Termos de geração de energia cinética turbulenta	J/m <sup>3</sup>
$Y_M$	Flutuações na dilatação	J/m <sup>3</sup>
$C_{1\epsilon}C_{2\epsilon}C_{3\epsilon}; C_{2\epsilon}^*$	Constantes empíricas	(-)
$Pr_t$	Número de Prandtl turbulento	(-)
$R_{\epsilon}$	Termo de ajuste para a dissipação turbulenta	J/m <sup>3</sup> s <sup>2</sup>
$C_{ij}$	Termo do gradiente de velocidade	N/m <sup>3</sup>
$D_{T,ij}$	Termos da difusão turbulenta	N/m <sup>3</sup>
$D_{L,ij}$	Termo da difusão molecular	N/m <sup>3</sup>
$P_{ij}$	Produção de tensões no fluido	N/m <sup>3</sup>
$G_{ij}$	Flutuações devido ao gradiente de temperatura	N/m <sup>3</sup>
$W_p; W_v$	Frações mássica e volumétrica respectivamente	(-)
$C_{v\%}$	Percentual volumétrico de partículas na alimentação	%v/v
$d_{50c}$	Diâmetro de corte	$\mu\text{m}$
$y_{i(+)}$	Efeitos relacionados ao maior valor da variável de design	% m/m
$y_{i(-)}$	Efeitos relacionados ao menor valor da variável de design	% m/m
$y_i$	Magnitude dos efeitos individuais	% m/m
$eff_{\text{médio}}$	Média dos efeitos	% m/m
$eff_i$	Efeitos individuais de cada variável de design	% m/m
$O_k$	Valor observado	% m/m
$E_k$	Valor esperado	% m/m

#### Letras gregas

$\Delta$	Diferença entre um valor final e inicial de uma variável	(-)
$\Sigma$	Somatório	(-)
$\rho$	Densidade	kg/m <sup>3</sup>

$\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial y}, \frac{\partial w}{\partial z}$	Derivada parcial da velocidade pelos eixos cartesianos	$m/s^2$
$\nabla$	Gradiente (Somatório das variações parciais no espaço)	(-)
$\alpha_k$	Fração volumétrica da fase ou componente k	(-)
$\sigma$	Tensão normal ao plano	Pa
$\tau$	Tensão de cisalhamento (paralela ao plano)	Pa
$\lambda$	Viscosidade da dilatação volumétrica do fluido	Pa.s
$\mu$	Viscosidade dinâmica	Pa.s
$\beta$	Parâmetro da equação que descreve $\vec{F}_{lift}$	(-)
$\mu_t$	Viscosidade dinâmica turbulenta	Pa.s
$\kappa$	Energia cinética específica turbulenta	$J/m^3$
$\varepsilon$	Taxa de dissipação da energia cinética específica turbulenta	$J/m^3s$
$\sigma_k; \sigma_\varepsilon$	Constantes turbulentas de Prandtl	(-)
$\beta_k; \beta_\varepsilon$	Números de Prandtl efetivos inversos	(-)
$\mu_{eff}$	Viscosidade dinâmica efetiva	Pa.s
$\eta$	Parâmetro empírico da taxa de deformação do fluido	(-)
$\phi_{ij}$	Deformação pela ação da pressão	$N/m^3$
$\chi^2$	Fator do Qui Quadrado	(-)

#### Sobrescritos

i	Componente da mistura	(-)
H	Componente hidrato da mistura	(-)
n	Número de termos da somatória	(-)

#### Subscritos

k, p, q	Representação dos componentes ou fases	(-)
$\omega$	Vorticidade	(-)
i,n	Unidade do volume de controle i	(-)
i,j	Eixo cartesiano primário e secundário respectivamente	(-)

<i>m</i>	Fase mistura	(-)
<i>p</i>	Fase partícula	(-)
<i>f</i>	Fase fluido	(-)
<i>s</i>	Fase sólida	(-)
<i>l</i>	Fase líquida	(-)

## SUMÁRIO

1 – INTRODUÇÃO.....	19
1.1 - Gás Natural.....	20
1.2 - Dióxido de Carbono (CO <sub>2</sub> ).....	22
1.3 - Motivação e proposta energética.....	24
1.4 – Separador hidrociclone.....	26
2 – OBJETIVOS.....	29
3 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	30
3.1 - Hidratos de Gases.....	30
3.1.1 – Densidade dos hidratos de gases.....	36
3.2 – Reator NETmix®.....	37
3.3 – Produção e separação dos hidratos de gases.....	38
3.4 – Hidrociclones.....	40
3.4.1 - Estudos com as variáveis de design.....	44
3.5 – Fluidodinâmica computacional e modelagem matemática.....	49
3.5.1 Equações de conservação de massa e momentum.....	50
3.5.2 Abordagem Multifásica Euleriana – Euleriana.....	56
3.5.3 Métodos de obtenção de variáveis médias ( <i>averaging</i> ) e Turbulência.....	64
4 – METODOLOGIA.....	75
4.1 – Validação do modelo.....	76
4.2 – Estudo da influência das variáveis de design.....	80
5 – RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	83
5.1 – Validação do modelo fluidodinâmico proposto.....	83
5.2 – Malhas computacionais dos hidrociclones separadores.....	89
5.3 – Análise estatística da performance de cada hidrociclone na separação dos hidratos.....	90
5.4 – Análise fluidodinâmica de cada hidrociclone.....	96
6 - CONCLUSÕES.....	111
7 – PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS.....	114
8 - REFERÊNCIAS.....	115

## 1 – INTRODUÇÃO

A matriz energética brasileira nos últimos anos vem proporcionando o desenvolvimento de energias alternativas, como o gás natural, que possui aplicações em produção de energia elétrica. No entanto, esta produção de energia resulta na emissão de CO<sub>2</sub> através das termoelétricas, indústrias de ferro e aço, de cimento entre outras.

Desta maneira, oportunidades de pesquisa são criadas com proposta de desenvolvimento de soluções alternativas em transporte e controle de emissão de gases, ou de melhoria das tecnologias que já estão disponíveis, transformando-as em soluções viáveis economicamente, bem como mais seguras do ponto de vista operacional, proporcionando um maior controle das emissões e transporte de CO<sub>2</sub>, além do transporte de gás natural.

Dentre as tecnologias de captura, armazenamento e transporte de gases disponíveis no mercado, os hidratos de gases têm a possibilidade de armazenar um alto volume de gás, através da sua estrutura cristalina, em condições brandas de temperatura e pressão.

Hidratos são estruturas cristalinas, que se assemelham com gelo, em que moléculas de água formam “gaiolas” estáveis termodinamicamente, que capturam moléculas de gases. Podem ser formados a partir da injeção dos gases em uma corrente de água sob temperaturas de 4 a 7 °C e pressões de 30 a 40 atm e, depois de formados, podem ser armazenados em temperaturas pouco negativas e pressão ambiente, o que seria uma vantagem de segurança em relação a métodos de armazenamento de gases em alta pressão.

Quando os hidratos são produzidos dentro do reator, ainda há a presença de água e gás residuais que precisarão ser separados da corrente eFluente, com o intuito de concentrar os hidratos produzidos para posterior armazenamento e transporte, além de recuperar a água e o gás para retornarem à linha de produção.

Nesse sentido, este trabalho tem como objetivo a avaliação da utilização do hidrociclone como equipamento de separação primária dos hidratos na corrente eFluente do reator de sua produção, além de avaliar a fluidodinâmica da suspensão aquosa dos hidratos, o que consiste em um estudo totalmente novo na comunidade científica.

Foi avaliado a influência da proporção geométrica do hidrociclone separador na recuperação dos hidratos, sendo avaliadas 4 variáveis de design: diâmetro do *overflow*

( $D_o$ ), diâmetro do *underflow* ( $D_u$ ), comprimento do *vortex finder* ( $L_{vf}$ ) e comprimento do corpo do hidrociclone ( $L$ ), desconsiderando a altura do *overflow*.

### 1.1 - Gás Natural

O gás natural é composto basicamente por metano ( $CH_4$ ), aproximadamente 85%, etano ( $C_2H_6$ ), de 3 a 8% e outros gases em pequenas frações como: propano, butano, pentano, dióxido de carbono, gás sulfídrico e gás nitrogênio ( $C_3H_8$ ,  $C_4H_{10}$ ,  $C_5H_{12}$ ,  $CO_2$ ,  $H_2S$  e  $N_2$  respectivamente), sendo ele uma matéria prima de suma importância para o desenvolvimento econômico do país.

O consumo de gás natural no Brasil está na sua maior parte no setor industrial e na geração de energia elétrica, sendo menor em outros setores como: automotivo, residencial, comercial e cogeração. Isso pode ser confirmado de acordo com o boletim mensal de acompanhamento da indústria de gás natural de setembro de 2018, emitido pelo Ministério de Minas e Energia (Tabela 1).

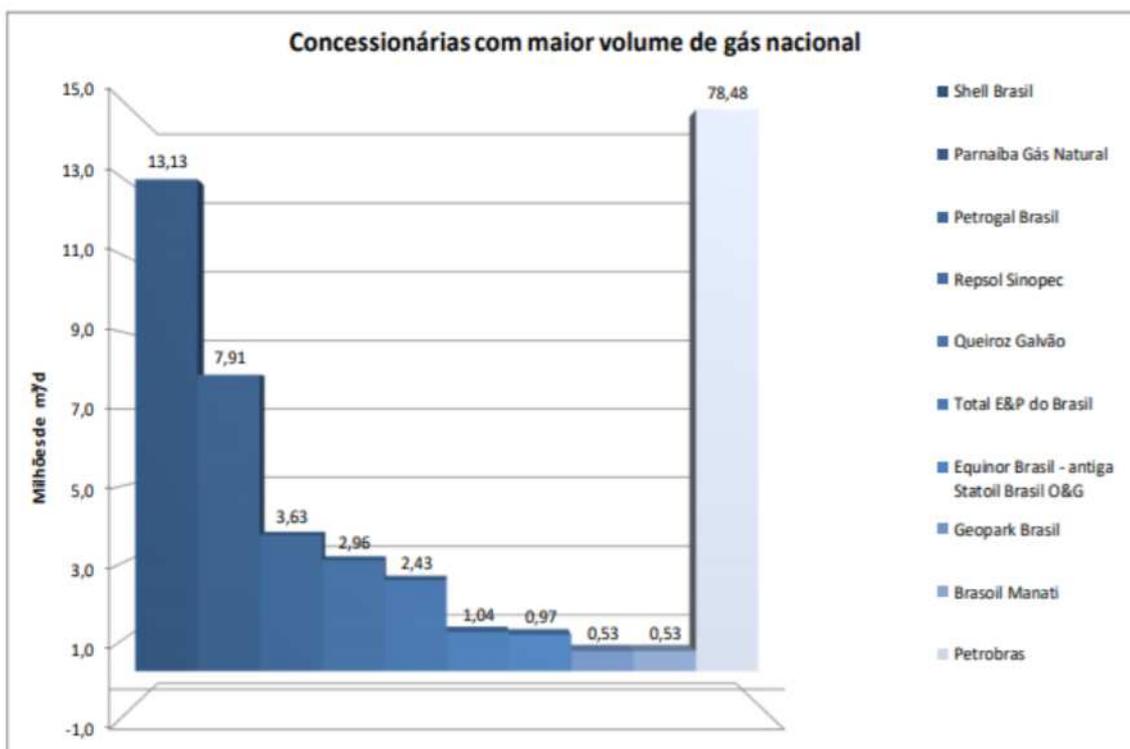
Tabela 1 – Média de consumo de gás natural no Brasil em 2018.

SETOR	CONSUMO (em milhões de $m^3$ /dia)
Industrial	40,02
Geração de energia elétrica	29,92
Outras fontes	11,22
Demanda total	81,16

Fonte: MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA (2018)

Dentro da cadeia de produção nacional, 98,8% do gás natural fica responsável por 10 grandes concessionárias. Na Figura 1 pode ser observado a quantidade produzida por cada concessionária em milhões de  $m^3$ /dia.

Figura 1 – Produção nacional de gás natural.



Fonte: MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA (2018)

A partir da análise dessa grande quantidade de gás natural sendo produzido e consumido diariamente no país, certas preocupações surgem no que se diz respeito ao gerenciamento e garantia de uma logística altamente estável e robusta para a distribuição dessa matéria prima, obtendo assim, uma entrega do produto segura e otimizada aos clientes.

O sistema predominante para transportar o gás natural consiste no seu escoamento através de tubulações (gasodutos). Esse sistema de transporte demanda altos custos de instalação, pois são necessárias longas tubulações específicas para este sistema de transmissão, além de estações de compressão, reguladores, válvulas entre outros componentes (MERCADO e SÁNCHEZ, 2015).

No interior das estações de compressão, a pressão de operação pode chegar a 1400 psi (96,5 bar), um valor que apresenta um certo risco à segurança de operação, além de demandar um alto gasto energético para atingir essas dimensões da variável (MERCADO e SÁNCHEZ, 2015). BRITO *et al.* (2009) esclarece que a frequência de acidentes no sistema de distribuição de gás natural é baixo, mas se vier a ocorrer algum, será em dimensões catastróficas, devido a condição intensa de pressão nas descargas

dos compressores e, se houver vazamentos nas tubulações, grande quantidade de gás inflamável e causador do efeito estufa será lançado na atmosfera.

Outro fator que encarece a construção da linha de distribuição de gás natural é o fato de que em alguns locais a tubulação precisa passar por baixo do nível do solo, acarretando em custos de preparação e modificações do terreno no qual será instalado essas tubulações (MERCADO e SÁNCHEZ, 2015).

## 1.2 - Dióxido de Carbono (CO<sub>2</sub>)

O dióxido de carbono, ou gás carbônico, é um gás incolor, inodoro, não inflamável, levemente ácido e parcialmente solúvel em água, sendo uma matéria prima de grande importância para a indústria.

Sua aplicação se encontra na gaseificação de bebidas, agente neutralizante em processos químicos, utilizado em misturas metabólicas na medicina, agente extrator em estado supercrítico de fase, entre várias outras aplicações.

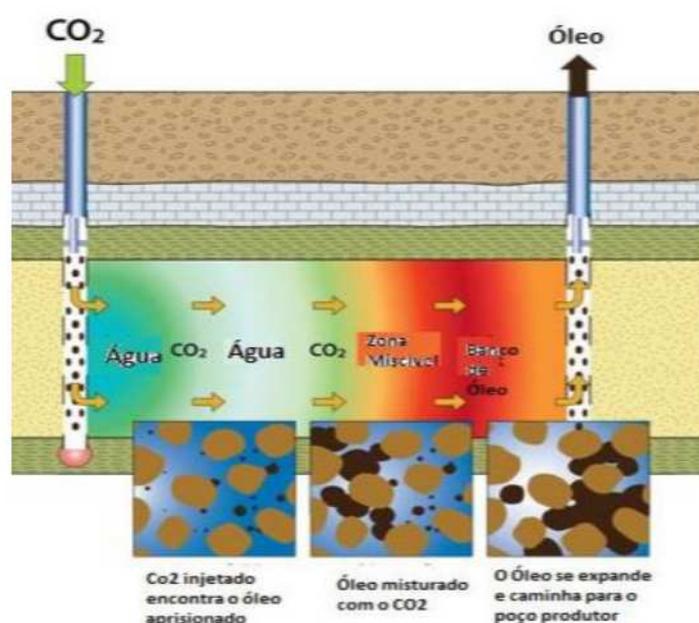
Além dessas tantas aplicações do gás carbônico, uma se destaca no setor industrial do petróleo, sendo a utilização deste fluido na extração de petróleo em reservatórios carbonáticos subterrâneos.

De acordo com os autores ROSA *et al.* (2006), uma das aplicações da injeção do gás carbônico nos reservatórios de petróleo, consiste na manutenção da pressão adequada do reservatório ou na alteração da interação rocha/óleo quando esse gás se mistura com os fluidos do reservatório.

Outras finalidades importantes da injeção de CO<sub>2</sub>, seria reduzir a viscosidade do óleo bruto extraído e aumentar a pressão de extração, dois parâmetros fluidodinâmicos de extrema importância na melhoria da eficiência de extração do petróleo, além de reduzir a saturação do óleo residual de extração (TELETZKE *et al.*, 2005).

O processo de injeção de CO<sub>2</sub> nos reservatórios de óleo no fundo do mar pode ser visto na Figura 2.

Figura 2 – Injeção de CO<sub>2</sub> para aumentar a eficiência de extração de petróleo.



Fonte: FILHO (2016).

O processo de injeção de CO<sub>2</sub> nos poços apresenta outra grande vantagem para o meio ambiente, que seria uma destinação adequada do CO<sub>2</sub>, evitando sua emissão na atmosfera, o que iria contribuir para o efeito estufa.

Uma das formas de captura do CO<sub>2</sub> de processos industriais que o emitem, é através de sua absorção utilizando soluções aquosas de aminas. Normalmente a indústria opta por utilizar a monoetanolamina (MEA) e a dietanolamina (DEA) (KOTHANDARAMAN *et al.*, 2016).

O autor ROCHELLE (2009) explica que em termos de custo-benefício a utilização da MEA é mais viável, por ser mais barata e apresentar baixa perda ao longo do processo de captura.

Porém o custo de instalação do processo de captura de CO<sub>2</sub> por solução aquosa de amina é um gargalo, uma vez que necessita da instalação de uma coluna de absorção, para capturar o CO<sub>2</sub> e outra de dessorção, para liberá-lo e comprimí-lo. Todo esse processo demanda bastante energia e grande espaço industrial.

Nesse sentido é interessante estudar métodos alternativos de captura e transporte de gases com um alto valor agregado, como os gases CO<sub>2</sub> e gás natural (CH<sub>4</sub>), com o intuito de descobrir um método eficiente e com bom custo-benefício.

### 1.3 - Motivação e proposta energética

Para transportar os gases  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  em dutos, a preocupação com o sistema de transmissão é a mesma para ambos: altas pressões de descarga dos compressores, tubulações especiais com alto custo e, no caso do  $\text{CH}_4$ , risco de vazamentos que podem levar a acidentes catastróficos (CHAN, 2015).

Tendo conhecimento dos riscos e dificuldades envolvidos no gerenciamento de gás natural e  $\text{CO}_2$ , é de nobre importância se discutir e propor novas alternativas de sistemas de captura, armazenamento e logística desses compostos.

É necessário um sistema estável, econômico e ao mesmo tempo viável industrialmente para gerenciar grandes quantidades de gases do efeito estufa, uma vez que o impacto positivo de um bom gerenciamento nacional, irá contribuir com a qualidade do meio ambiente em todo o mundo.

Um método alternativo de se capturar e armazenar os gases  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$ , seria por meio da reação de precipitação das estruturas cristalinas dos hidratos de gás. Vários autores já estudaram esse fenômeno (DASHTI *et. al.*, 2015; KOH e SLOAN, 2007; XIAOFANG *et. al.*, 2013; YANG, 2008), apresentando estudos e informações importantes a respeito dos hidratos de gases, nos quais são cruciais para o entendimento a respeito da produção desse sólido cristalino, além de caminhos para entender o seu potencial no setor de fontes alternativas de energia.

O método mais comum de produção de hidratos é através de reatores tanque pressurizados e agitados, no qual promovem o contato da água com o gás de interesse, geralmente  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$ , com o objetivo de estudar a cinética de formação dos cristais dos hidratos (RENAULT-CRISPO *et. al.*, 2017; VELUSWAMY *et. al.*, 2017).

Porém, esse método convencional apresenta limitações com respeito a área de contato gás-água, que é essencial para a taxa de formação dos hidratos, ao passo que, quando formados, os hidratos flutuam para a superfície reacional, por serem menos densos que a água, e formam uma camada que diminui a área superficial específica dos sólidos, consequentemente limitando os pontos de nucleação de novos cristais (VYSNIAUSKAS e BISHNOI, 1983; STERN *et. al.*, 1996).

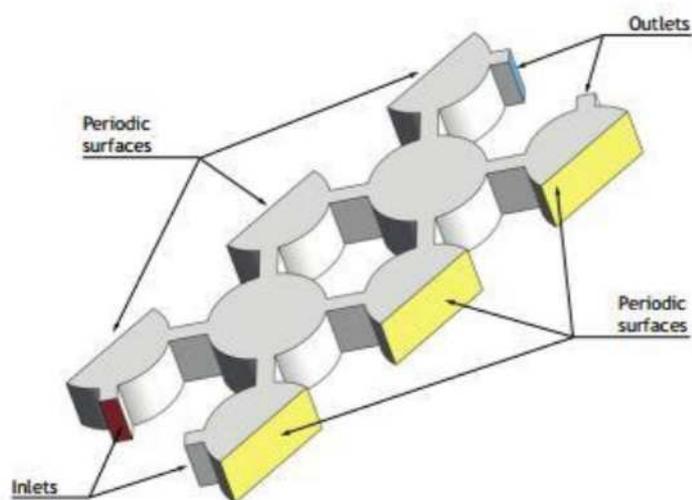
No processo de precipitação dos hidratos há uma grande liberação de calor, o que atrapalha a estabilidade física de sua estrutura cristalina. Para resolver esse problema deve se ter um meio eficiente para a retirada do calor de precipitação, evitando assim a dissociação do hidrato formado.

Uma nova tecnologia reacional de mistura estática NETmix®, desenvolvida e patenteada pela Universidade de Porto (UPorto), possui uma conformação estrutural na qual aumenta consideravelmente a superfície de contato entre o gás e a água de maneira a aumentar a transferência de massa e calor na formação dos cristais, mantendo-os sempre em movimento sob fluxo cruzado.

Essas condições de fluxo evitam a estagnação e aglomeração do sólido formado, o que seria um problema de superfície de contato reacional e lida bem com o problema da quantidade de calor gerada no processo de precipitação dos hidratos, que necessita ser retirado para manter a estabilidade do hidrato.

O reator de mistura estática NETmix® pode ser visto na Figura 3, no qual várias câmaras reacionais são cruzadas para aumentar a transferência de calor e massa do meio reacional.

Figura 3 – Reator de mistura estática NETmix®, imagem em corte lateral das câmaras reacionais.



Fonte: FONTE *et. al.* (2012).

No momento da passagem da água e do gás pelas câmaras, em uma pressão aproximada de 50 atm e temperatura próxima a 5 °C, os cristais de hidrato se formam e ambos os fluidos carregam os sólidos para fora do reator, gerando assim uma corrente eFluente multifásica.

A corrente eFluente consiste em praticamente água e hidratos de gás, sendo necessário a separação dos dois componentes de forma a preparar o hidrato para seu armazenamento e recircular a água residual de volta ao processo de formação de novos

hidratos. Nesse sentido, é necessário estudar e selecionar algum método de separação que melhor se aplica a essa condição do sistema.

#### 1.4 – Separador hidrociclone

O hidrociclone, mostrado na Figura 5, é composto por duas sessões, a superior, que compreende a parte cilíndrica do equipamento, e a inferior, que compreende a parte cônica do mesmo.

A suspensão entra na parte cilíndrica em movimento tangencial, juntamente com a força da gravidade, atuando no sistema, a junção dessas forças faz com que forme uma espiral descendente externa, na qual é arrastada a fração mais pesada em direção a saída inferior do equipamento, chamada de *underflow*.

A alta velocidade tangencial da suspensão causa a formação de um vórtice ascendente interno (região de baixa pressão), direcionado pelo *vortex finder*, que suga a fração mais leve e a direciona até a saída superior, o *overflow*.

Os hidrociclones apresentam a vantagem de serem versáteis na função de degaseificar líquidos; classificar sólidos mais densos ou menos densos que a água, dependendo do design do equipamento; possuir construção simples e de baixo custo; necessitarem de pouco equipamento auxiliar e manutenção de baixo custo; serem pequenos em relação a outros separadores, o que economiza espaço e operam em baixos tempos de residência, dando a eles vantagens em relação a rapidez de separação.

Porém, o hidrociclone é um equipamento de separação primário, no qual, na maioria de suas aplicações, requer a utilização de mais de uma unidade ou em conjunção com outro tipo de equipamento (Figura 4).

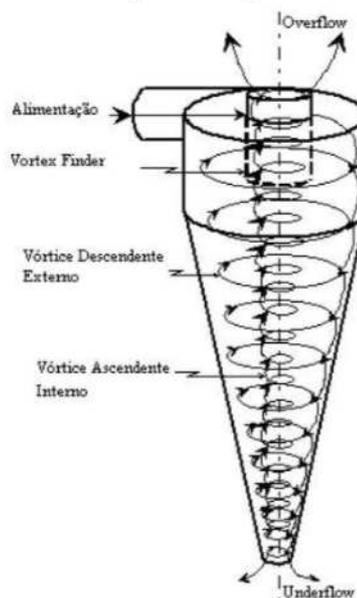
Figura 4 – Bateria de hidrociclones em paralelo.



Fonte: AKW EQUIPAMENTOS E PROCESSOS (2019).

Isso configura uma linha de separação em série ou paralelo para atingir melhores eficiências de separação, mas por outro lado, é acompanhado com um aumento no custo de energia, investimento e manutenção (SVAROVSKY, 2000).

Figura 5 – Desenho esquemático geral de um hidrociclone.



Fonte: AMARAL (2008).

Para separar a água residual do processo de formação dos hidratos, se escolheu utilizar o hidrociclone. Esse equipamento chama a atenção devido a sua simplicidade no design e modo de operação, possuir alta capacidade operacional, baixos custos de operação e manutenção, além de apresentar dimensões compactas e possuir a flexibilidade de ajuste do seu design para separar a água e recuperar partículas menos densas que a mesma, como é o caso das partículas de hidrato.

Em contrapartida do seu simples design, a física de movimentação dos fluidos e sólidos no interior de um hidrociclone é bastante complexa de ser estudada na prática. Porém, no campo de estudo das simulações numéricas e com os recursos computacionais evoluindo cada vez mais, o estudo da fluidodinâmica dentro dos hidrociclones se torna mais acessível e econômico.

A investigação de parâmetros geométricos importantes na avaliação da eficiência de separação de um hidrociclone, tais como: diâmetro de alimentação, diâmetro e comprimento da parte cilíndrica, angulação e comprimento da parte cônica, diâmetro e comprimento do *vortex finder* e diâmetro do *underflow*, são avaliados com maior facilidade e rapidez em simulações computacionais, evitando gastos da investigação experimental e tornando possível avaliar a influência de várias geometrias possíveis na eficiência de separação em um curto espaço de tempo.

## 2 – OBJETIVOS

O objetivo geral desta pesquisa compreende em:

- Avaliar a capacidade do hidrociclone em separar o hidrato de gás da suspensão aquosa que eflui do reator NETmix®, verificando em quanto esse separador consegue aumentar a concentração de hidratos na sua descarga.

Os objetivos específicos compreendidos aqui são:

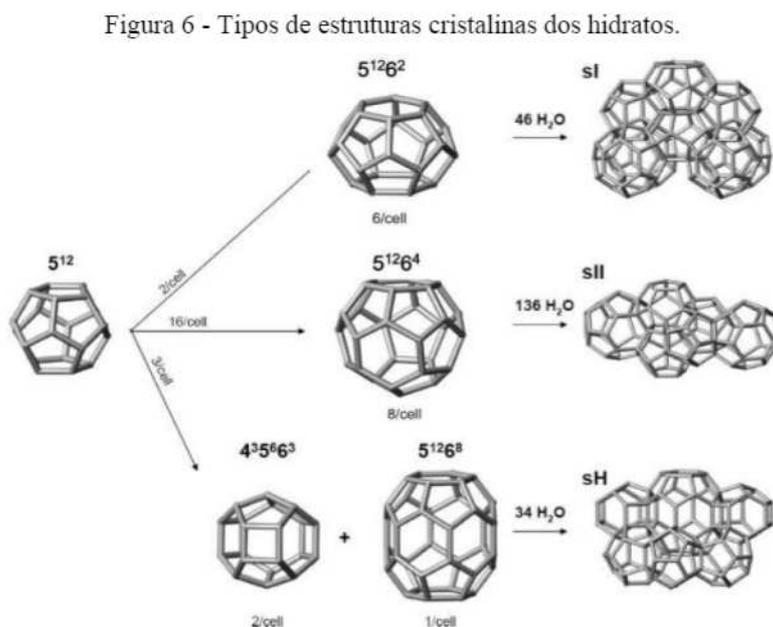
- Estudar a influência das variáveis de design: Diâmetro do *overflow* ( $D_o$ ), Diâmetro do *underflow* ( $D_u$ ), Comprimento do *vortex finder* ( $L_{vf}$ ) e Comprimento total do hidrociclone ( $L$ ) na capacidade do hidrociclone em separar (espessar) a suspensão aquosa de hidrato;
- Estudar a fluidodinâmica do escoamento da suspensão água/hidrato de gás que ocorre no interior dos hidrociclones;
- Utilizar das ferramentas: Fluidodinâmica Computacional (CFD) e Estatística para a análise dos resultados obtidos neste trabalho e avaliar a performance do hidrociclone;
- Gerar dados inéditos e conclusões sobre a fluidodinâmica da suspensão aquosa de hidrato de gás, contribuindo com a comunidade científica no que diz respeito ao desenvolvimento de novas tecnologias de processamento desse sólido promissor para as indústrias de gerenciamento de gás e energia.

### 3 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### 3.1 - Hidratos de Gases

Hidratos de gás são sólidos cristalinos com aspecto de neve, em que moléculas de gases, com tamanhos entre 3,5 e 7,5 Å (angstrom), como por exemplo: CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> e C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, são aprisionadas em “gaiolas” formadas por moléculas de água, que se estabilizam em estruturas geométricas híbridas (SLOAN e FLEYFEL, 1992).

A interação entre as moléculas de água da gaiola e as moléculas do gás é do tipo Van de Waals, que são interações fracas entre moléculas, porém a estrutura cristalina dos hidratos como um todo se conforma de uma maneira que os ângulos entre as interações intermoleculares se estabilizam fortemente. Essas estruturas podem ser observadas na Figura 6.



Fonte: KOH e SLOAN (2007).

As gaiolas de água são mostradas na Figura 6 na forma  $X^n$ ,  $X^nY^m$ ,  $X^nY^mW^k$ , em que X, Y e W representam o número de arestas de uma face da estrutura, enquanto “n”, “m” e “k” são o número de faces da gaiola. As estruturas mostradas também se subdividem em três grupos: sI, sII e sH, nas quais todas apresentam as cavidades pequenas ( $5^{12}$ ), se diferenciando umas das outras nas formas das cavidades grandes.

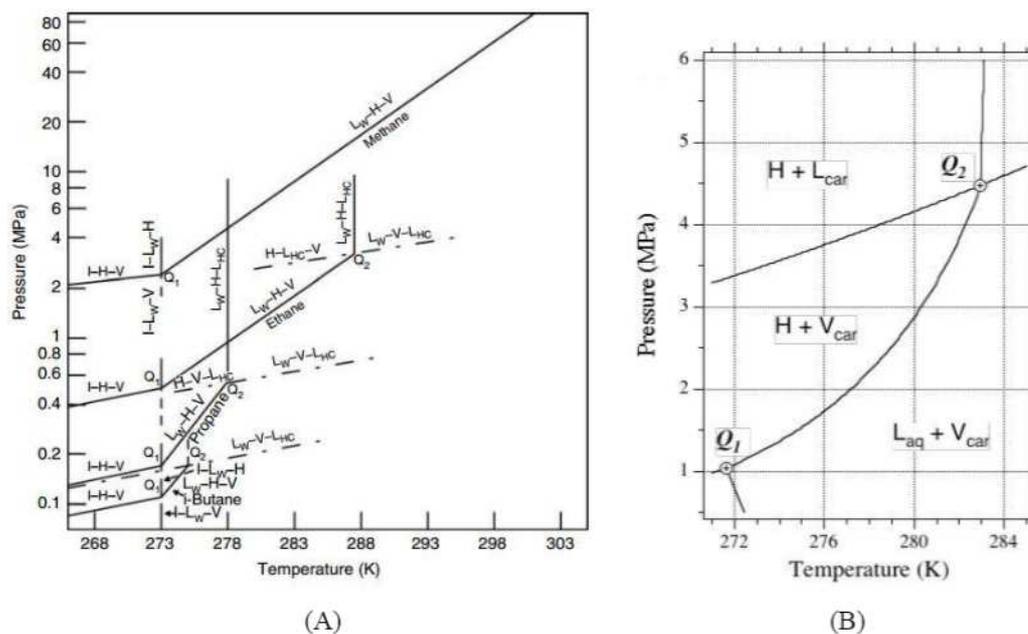
Para as estruturas sI, as cavidades largas são polígonos do tipo  $5^{12}6^2$ , enquanto que para as estruturas sII as cavidades largas são polígonos do tipo  $5^{12}6^4$ , já para as estruturas do tipo sH, essas cavidades são polígonos do tipo  $5^{12}6^8$  juntamente com polígonos  $4^35^66^3$ .

O tipo de estrutura formada nos hidratos depende do tamanho das moléculas dos gases a serem capturados, por exemplo, hidratos de  $CO_2$ ,  $CH_4$  e  $C_2H_6$  formam estruturas do tipo sI, já o hidrato de  $C_3H_8$  forma uma estrutura do tipo sII. Quando há captura de mais de um tipo de gás dentro das mesmas gaiolas de água, os hidratos formam as estruturas do tipo sH (KOH e SLOAN, 2007).

As condições de temperatura e pressão para a formação dos cristais de alguns hidratos comuns podem ser observadas nos diagramas de equilíbrio da Figura 7. De acordo com a Figura 7.A, é possível extrair informações sobre quais transformações de fases estão presentes na formação dos hidratos de metano, etano, propano e butano, que são: I (gelo); H (hidrato do gás); V (hidrocarboneto gás);  $L_w$  (água líquida);  $L_{HC}$  (hidrocarboneto líquido).

Semelhantemente, na Figura 7.B, é apresentado as transformações de fases na formação do hidrato de  $CO_2$ , que são: H (hidrato de  $CO_2$ );  $L_{car}$  ( $CO_2$  líquido);  $V_{car}$  ( $CO_2$  gás) e  $L_{aq}$  (água líquida). Em ambos os gráficos também trazem o ponto quadruplo, representados por  $Q_1$  e  $Q_2$ , que indicam as condições de temperatura e pressão nas quais há a presença de quatro fases distintas.

Figura 7 – Condições de temperatura e pressão para a formação de alguns hidratos de gases comuns.



Fontes: (A) SLOAN e KOH (2007); (B) BAKKER e THIÉRY (1994).

A faixa de formação dos hidratos de  $\text{CH}_4$  e  $\text{CO}_2$ , de acordo com a Figura 7, é entre temperaturas de 273 e 280 K e pressões de 30 a 40 bar aproximadamente.

Segundo STERN *et. al.* (2001), após formado, o hidrato de metano é preservado em 93% aproximadamente por 24 h em temperaturas abaixo de 271 K e em pressões ambientes. Como o hidrato de  $\text{CO}_2$  é mais estável termodinamicamente que o hidrato de  $\text{CH}_4$ , de acordo com a Figura 7, ele provavelmente se conservará por mais tempo em condições semelhantes.

Essas informações são de grande importância para o controle das condições de armazenamento e transporte dos hidratos, visto que esses sólidos apresentam um grande potencial para o transporte de gás, pois, além de serem estáveis termodinamicamente, eles apresentam uma capacidade de captura de 160 a 170 volumes de gás por volume de hidrato (SLOAN e KOH, 2007).

Isso representa um processo com condições brandas e mais seguras de captura e transporte, levando a um gasto energético menor comparado aos processos de compressão dos gases em cilindros e em gasodutos, além de menor ocupação de volume para transporte por ser sólido.

No trabalho dos autores SLOAN e FLEYFEL (1992), é mostrado que a entalpia de dissociação dos hidratos é fortemente dependente do tipo de estrutura cristalina formada, com influência das ligações de hidrogênio presentes entre as moléculas de água de suas gaiolas.

O tipo de gás e sua concentração nos hidratos, não influenciam na entalpia de dissociação dos mesmos, visto que no trabalho dos autores, diferentes tipos de correntes gasosas, com a mesma estrutura cristalina formada, apresentaram entalpias de dissociação semelhantes.

Para correntes gasosas mistas de metano, propano e butano, a alteração das frações de metano não alterou o valor da entalpia de dissociação do hidrato formado, uma vez que o tipo sII de estrutura cristalina formada não se alterou. É interessante compreender sobre a dissociação dos hidratos para saber em quais condições de temperatura e pressão o gás retido nos cristais irá ser liberado para o ambiente, tendo assim um melhor controle do mesmo.

Alguns estudos vêm sendo realizados com os hidratos de gases, principalmente na síntese dos hidratos de CO<sub>2</sub>, nos quais aditivos químicos trazem melhorias nas condições de formação desses compostos cristalinos. Os autores DASHTI *et. al.* (2015), apresentam as variáveis que envolvem a síntese dos hidratos, que são elas: tempo de indução (tempo que leva para começar a nucleação dos cristais), o consumo de gás, pressão de equilíbrio de formação do hidrato, recuperação de CO<sub>2</sub> e fator de separação (relação entre quantidades de CO<sub>2</sub> na corrente de recuperação e na corrente residual de gás).

As duas últimas variáveis, citadas no parágrafo acima, são calculadas para medirem o desempenho da captura de um gás através da estrutura cristalina do hidrato em uma corrente gasosa pura (recuperação do componente) ou em uma corrente gasosa mista (fator de separação). As Equações 1, 2, 3 e 4 mostram como calcular essas variáveis (LINGA *et. al.*, 2007).

$$\Delta n_g = n_{g,0} - n_{g,t} = \frac{P_0 V}{Z_0 RT} - \frac{P_t V}{Z_t RT}$$

$$n_{g,t} = n_{g,0} - \left( \frac{P_0 V}{Z_0 RT} - \frac{P_t V}{Z_t RT} \right) \quad (1)$$

$$\Delta n_g^i = n_{g,0}^i - n_{g,t}^i = \frac{y_0^i P_0 V}{Z_0^i RT} - \frac{y_t^i P_t V}{Z_t^i RT}$$

$$n_{g,t}^i = n_{g,0}^i - \left( \frac{y_0^i P_0 V}{Z_0^i RT} - \frac{y_t^i P_t V}{Z_t^i RT} \right) \quad (2)$$

Em que:  $n_{g,0}$  e  $n_{g,t}$  são o número total de mols do gás no instante de tempo igual a 0 e no instante de tempo t, final de sua captura (formação do hidrato), respectivamente;  $\Delta n_g$  é a variação do número de mols do gás (quantidade de mols no hidrato); P é a pressão de formação do hidrato (Pa); V é o volume de gás ( $m^3$ ) considerado constante durante a síntese do hidrato; Z é o fator de compressibilidade do gás (adimensional); T é a temperatura constante da fase líquida (K); R é a constante dos gases ideais (J/mol.K);  $i$  se refere ao componente  $i$  da mistura gasosa e  $y$  é a fração molar na fase gás.

$$\text{Recuperação} = \frac{n_g^H}{n_{g,0}} = \frac{\Delta n_g}{n_{g,0}} \quad (3)$$

$$\text{Fator de Sep.} = \frac{n_g^H \cdot n_{A,t}}{n_{g,t} \cdot n_A^H} = \frac{\Delta n_g \cdot n_{A,t}}{n_{g,t} \cdot \Delta n_A} \quad (4)$$

Em que:  $n_g^H$  e  $n_{g,0}$  são o número de mols do gás, foco de estudo, no hidrato e o número de mols do mesmo inicialmente;  $\Delta n_g$  é a variação do número de mols do gás;  $n_{g,t}$  e  $n_{A,t}$  são o número de mols do gás, foco de estudo, e o número de mols de um gás A ao final da síntese do hidrato;  $n_A^H$  é o número de mols de um gás A da mistura no hidrato e  $\Delta n_A$  a variação do número de mols do gás A da mistura.

Os valores dos fatores de compressibilidade dos gases podem ser calculados pelas equações cúbicas de estado (Peng-Robinson ou Soave-Redlich-Kwong) e as frações molares ( $y^j$ ) do gás na mistura pode ser encontrado através do número de mols do gás foco de estudo, dividido pelo número de mols da mistura gasosa ao final da síntese dos hidratos.

Para o cálculo desta última variável é necessário calcular o fator de compressibilidade da mistura, levando em consideração parâmetros de mistura entre os componentes da corrente gasosa eFluente. No caso do gás natural, o mesmo pode ser considerado como sendo metano ( $CH_4$ ), para os cálculos, uma vez que é o composto predominante na mistura de gás natural.

As melhorias nas condições de formação dos hidratos se resumem na tentativa de reduzir tanto o tempo de indução quanto a pressão de equilíbrio de formação desses compostos, bem como aumentar a recuperação e o fator de separação dos mesmos.

Os aditivos químicos utilizados são divididos em promotores termodinâmicos e promotores cinéticos, em que os primeiros irão formar uma estrutura de captura de gás em pressões de equilíbrio menores que a pressão de equilíbrio de formação dos hidratos sem esses promotores, já os promotores cinéticos, que são compostos surfactantes, irão reduzir a tensão superficial da água, facilitando a formação dos hidratos pela facilitação de romper essa barreira energética.

Os promotores termodinâmicos são: Tetrahidrofurano (THF), ciclopentano, propano e brometo de tetra butil amônio (TBAB), enquanto os promotores cinéticos são: Cloreto de dodecil-trimetil amônio (DTAC) e Dodecil sulfato de sódio (SDS) (DASHTI *et. al.*, 2015).

Os autores PARK *et al.* (2013) estudaram a formação de hidratos com uma corrente gasosa de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> e utilizando o promotor THF na concentração de 1% mol reduziram o tempo de indução de 16,3 min para um tempo inferior a 1 min e a pressão de equilíbrio de formação de 8 MPa para 0,5 MPa.

Os autores DUC *et. al.*, (2007), utilizando um sistema gasoso de CO<sub>2</sub> e 0,29% em mol de TBAB, conseguiram reduzir a pressão de equilíbrio de formação do hidrato de CO<sub>2</sub> de 14,36 MPa para 0,84 MPa.

De acordo com a literatura, o tipo de água e a pressão de operação, apresentam uma influência muito significativa na indução à nucleação dos cristais do hidrato e na taxa global de formação.

Os autores VYSNIAUSKAS e BISHNOI (1983), estudando a formação do hidrato de metano em tanque agitado de 500 cm<sup>3</sup>, concluíram que o tipo de água interfere no tempo de início de nucleação dos cristais do hidrato, uma vez que, utilizando água de torneira com temperatura entre 10 e 15 °C, o tempo de indução à nucleação foi de 4,95 min, já com água de torneira na temperatura de 50 °C, esse tempo foi de 18,13 min.

É interessante então, que a alimentação de água no reator de formação de hidratos esteja em temperaturas com no máximo 10 °C, para favorecer a velocidade de nucleação, ao invés da mesma ser resfriada no interior do reator. Após o início da formação dos cristais do hidrato, os autores não verificaram nenhuma influência do tipo de água na cinética global da formação do sólido cristalino.

VYSNIAUSKAS e BISHNOI (1983), avaliando a influência da pressão de operação na formação do hidrato de metano com água duplamente destilada, quantificaram que um aumento de 20 bar (de 40 para 60 bar) na pressão do sistema

reacional, levaram a um aumento de 219,6% na taxa global de formação do hidrato. Visto isso, a variável pressão tem um papel significativo na otimização de algum processo para a produção de hidratos.

### 3.1.1 – Densidade dos hidratos de gases

No campo de estudos das simulações fluidodinâmicas, a densidade é uma das características físicas mais importantes por fazer parte da maioria das equações fundamentais dentro da técnica CFD.

Os hidratos de gases possuem sua densidade variável de acordo com a quantidade de gás capturado em sua estrutura, sendo que maiores quantidades de gás capturado levarão a menores valores de densidade e menores quantidades de gás capturados levarão a maiores valores na densidade dos hidratos (AYA *et. al.*, 1997).

Alguns autores têm estudado algumas técnicas para a obtenção das densidades dos hidratos como: simulações de dinâmica molecular, simulações com modelos probabilísticos estocásticos (método de Monte Carlo) e determinação através da manipulação das condições termodinâmicas dos hidratos, pois elas influenciam diretamente na concentração de moléculas de gás capturado (AYA *et. al.*, 1997; BOZZO *et. al.*, 1975).

Os autores CHIALVO *et. al.* (2002), trabalharam na simulação da dinâmica molecular dos hidratos em temperatura e pressão constante, da qual foi estimado as densidades dos hidratos de estrutura sI (CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>). Eles encontraram valores da densidade em torno de 1168 kg/m<sup>3</sup> para os hidratos de CO<sub>2</sub> e em torno de 954 kg/m<sup>3</sup> para os hidratos de CH<sub>4</sub> sob condições de pressão igual a 5 MPa e temperatura igual a 270 K.

Os autores FERDOWS e OTA (2006) realizaram simulações através da técnica estocástica do modelo de Monte Carlo sob pressão e temperaturas fixas para determinar a densidade de hidratos de CO<sub>2</sub>. Os autores encontraram valores em torno de 1130 kg/m<sup>3</sup> para a densidade nas condições de pressão igual a 4 MPa e temperatura igual a 274 K.

Utilizando os gráficos termodinâmicos de pressão versus temperatura, os autores BOZZO *et. al.* (1975), determinaram a densidade de hidratos de gás cloro (Cl<sub>2</sub>) e hidratos de CO<sub>2</sub>, encontrando valores em torno de 1220 kg/m<sup>3</sup> para os hidratos de Cl<sub>2</sub> e

valores em torno de  $1110 \text{ kg/m}^3$  para os hidratos de  $\text{CO}_2$ , sob condições de pressão igual a 42 atm e temperatura de  $42^\circ\text{F}$  (278 K).

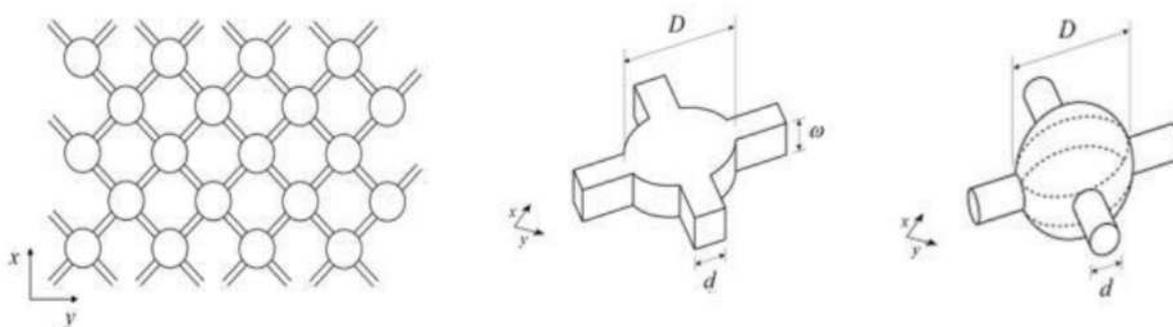
Em geral, a densidade dos hidratos nas condições da reação de sua formação, encontram-se em torno de  $950$  a  $1170 \text{ kg/m}^3$  aproximadamente, considerando os hidratos de  $\text{CH}_4$  e hidratos  $\text{CO}_2$ , segundo a literatura pesquisada.

### 3.2 – Reator NETmix®

A tecnologia NETmix®, patenteada pela Universidade de Porto, consiste em uma rede de câmaras interconectadas por canais de transporte. Cada câmara possui dois canais de entrada e dois de saída, orientados com um ângulo de  $45^\circ$  em cruzamento entre si, como pode ser visto na Figura 8, nos modelos 2D e 3D das câmaras. Os fluidos entram na parte inferior de cada câmara, se cruzam no interior das mesmas e escoam para fora, com uma mistura das duas correntes nos dois canais superiores, assim esse perfil de mistura vai se desenvolvendo até a saída da rede de reatores.

LARANJEIRA *et al.* (2009), aborda em seu trabalho, que a configuração do NETmix® de duas câmaras conectadas por um canal, que se repetem ao longo da rede, se assemelha a uma rede de dois reatores de mistura perfeita (CSTR) conectados por um reator de fluxo pistonado (PFR). Devido às dimensões e o design dessa nova tecnologia, há uma alta interface de contato entre os fluidos e ausência de regiões com estagnação dos mesmos, o que contribui bastante para a transferência de calor e massa.

Figura 8 – Estrutura do NETmix®.



Fonte: FONTE *et al.* (2012).

FONTE *et al.* (2012), estudou a capacidade de mistura do NETmix® em comparação com os misturadores estáticos comerciais, no qual é comparado, em seu

artigo, o fator  $Z$  em função do número de Reynolds para o NETmix® e para esses misturadores comuns.

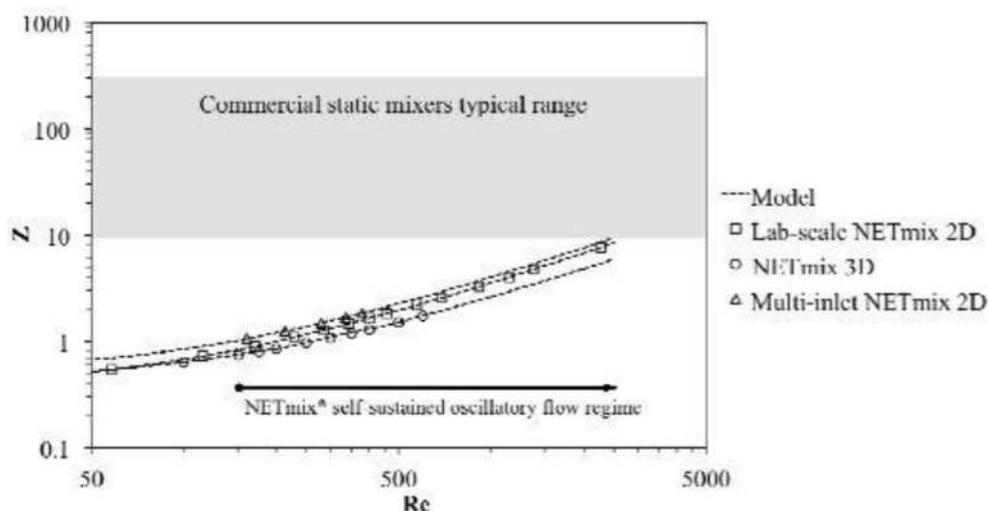
O fator  $Z$  é a relação da queda de pressão através do misturador estático dividido pela queda de pressão através de um tubo vazio de igual diâmetro e comprimento.

A Figura 9 mostra a variação do fator  $Z$  em função do número de Reynolds para o NETmix® 2D, em escala laboratorial, com duas entradas e duas saídas; a variação do fator  $Z$  para o NETmix® 3D, câmara esférica com conexões cilíndricas, e a variação do fator  $Z$  para o NETmix® 2D com várias entradas e saídas, seguindo a legenda da figura.

Na Figura 9 também demonstra a região de valores do fator  $Z$  para outros misturadores estáticos comerciais, concluindo que é notável que o fator  $Z$  para a nova tecnologia de mistura é consideravelmente menor do que para os misturadores estáticos comerciais.

Analisando esses resultados, infere-se que a queda de pressão através do NETmix® é bem menor comparada aos misturadores estáticos comuns, ou seja, há um menor gasto energético no bombeamento dos fluidos a serem misturados nos reatores.

Figura 9 – Comparação do fator  $Z$  entre o NETmix® e outros misturadores estáticos comerciais.



Fonte: FONTE *et. al.* (2012).

### 3.3 – Produção e separação dos hidratos de gases

Os estudos sobre a produção e separação dos hidratos, ainda são bastante escassos na literatura. Há algumas patentes no processo de síntese dos hidratos que os

autores mostram, sem muitos detalhes, como são formados e apenas comentam que há um determinado processo de separação, mas sem demais especificações.

Os autores KIMURA *et. al.* (2005), criaram uma patente de processamento e desidratação de hidratos de gases retirados do fundo do oceano, em que a suspensão de hidratos provinda do fundo do mar é processada em uma extrusora que retira a umidade excessiva da suspensão e resfria novamente os hidratos ao final da extrusão.

A SHELL OIL COMPANY (2001) criou uma patente de processamento de hidrocarbonetos líquidos provindos de reservatórios subterrâneos, em que os hidratos de gás são formados em um gerador tanque subterrâneo e posteriormente são separados da suspensão.

O autor da patente comenta que a separação pode ser feita com qualquer método tradicional de separação sólido-líquido, como: decantação, centrifugação ou separação em hidrociclones.

O autor GUDMUNDSSON (1996), desenvolveu uma patente de produção de hidratos para armazenamento e transporte, em que um jato de gotículas de água era aspergido em contracorrente com uma corrente de gás, da qual era resfriada e pressurizada no interior de um reator tanque.

Os hidratos ali formados, praticamente livre de umidade, iam para um processo de aglomeração com o objetivo de aumentar a sua densidade para posterior armazenamento e transporte.

No processo de aglomeração, é adicionado uma corrente extra de gás, com intuito de aumentar a quantidade de gás armazenado nos cristais de hidrato. Em sequência, o hidrato aglomerado com maior quantidade de gás, era separado da corrente residual do gás pela ação de um ciclone no processo.

Mesmo se tendo poucos estudos na parte de síntese e separação dos hidratos, esses estudos falam da ação do ciclone na separação dos hidratos, mostrando que esse processo tem um certo potencial para o objetivo de isolar os hidratos de gás.

Portanto, se dedicar à investigação da eficiência desse equipamento na separação dos hidratos se mostra interessante, uma vez que isso trará dados para a otimização do processo de separação em si e melhoramento do processo de produção de hidratos como um todo.

### 3.4 – Hidrociclones

Hidrociclones são equipamentos encontrados com grande frequência em indústrias de mineração, petróleo e bioindústrias devido à sua simplicidade estrutural, rendimento considerável, pequeno volume e baixo custo de manutenção (VAKAMALLA e MANGADODDY, 2017).

Embora não se tem estudos na literatura sobre a utilização de hidrociclones para a separação de uma corrente contendo hidrato de gás, água e gás residuais, sua simplicidade e baixo custo chamam a atenção para incluí-lo em um sistema de separação e purificação dos hidratos, como sendo separador primário.

Para um bom estudo da melhoria de separação de um hidrociclone, é necessário compreender como a separação no equipamento funciona, quais parâmetros e variáveis interferem seu desempenho, além de como obter e analisar sua eficiência de separação. Portanto, é apresentado em seguida, a teoria por trás do funcionamento dos hidrociclones.

O princípio de funcionamento do hidrociclone está na separação da sua corrente de alimentação através da ação de um campo centrífugo gerado pela entrada tangencial do equipamento.

Toda a corrente de entrada é direcionada para a parte inferior do hidrociclone, ao final da parte cônica, a velocidade tangencial é bastante alta, devido à diminuição gradativa do diâmetro nessa seção, levando assim a formação de uma coluna de baixa pressão (vórtex) no centro do equipamento, no qual irá direcionar a fração mais leve para o topo (*overflow*), enquanto a fração mais pesada é descarregada no *underflow*.

As partículas presentes na corrente do hidrociclone serão aleatoriamente distribuídas nas duas correntes separadas em seu interior conforme o perfil de escoamento multifásico ali presente. Assim, sua separação apresenta um caráter de probabilidade, em que, partículas mais pesadas tem maior chance de saírem no *underflow* e partículas mais leves tem chance de saírem no *overflow*.

Há dois tipos de eficiência de separação para o hidrociclone, a eficiência total e a eficiência granulométrica ou de classificação, na qual essa última leva em conta a fração recuperada para cada tamanho de partícula específico. A eficiência total leva em conta a quantidade de um componente separado no *overflow* ou *underflow* em relação à entrada:

$$E_T = \frac{M_{o/u} \cdot x_{o/u}}{M_i \cdot x_i} \quad (5)$$

Onde  $E_T$  é a eficiência total;  $M_{o/u}$  é a vazão mássica do *overflow* ou *underflow* (Kg/s);  $M_i$  é a vazão mássica da alimentação;  $x_{o/u}$  é a fração mássica de um componente qualquer na suspensão do *overflow* ou *underflow* (kg<sub>componente</sub>/kg<sub>o/u</sub>) e  $x_i$  é a fração mássica desse mesmo componente na suspensão de alimentação (kg<sub>componente</sub>/kg<sub>suspensão</sub>).

Para quantificar o quanto se recuperou de um fluido ou sólido particulado com distribuição uniforme de tamanho, a Equação 5 é suficiente, mas quando o sistema apresenta sólidos particulados com vários tamanhos de partícula diferentes, é necessário levar em conta a fração granulométrica recuperada de cada tamanho de partícula separado, uma vez que o efeito de separação é influenciado somente pela mobilidade das partículas no fluido e diferentes tamanhos sofrem diferentes influências das forças presentes no sistema, como: arrasto, gravidade, atrito com a parede do equipamento, atrito entre partículas, entre outras (SVAROVSKY, 2000).

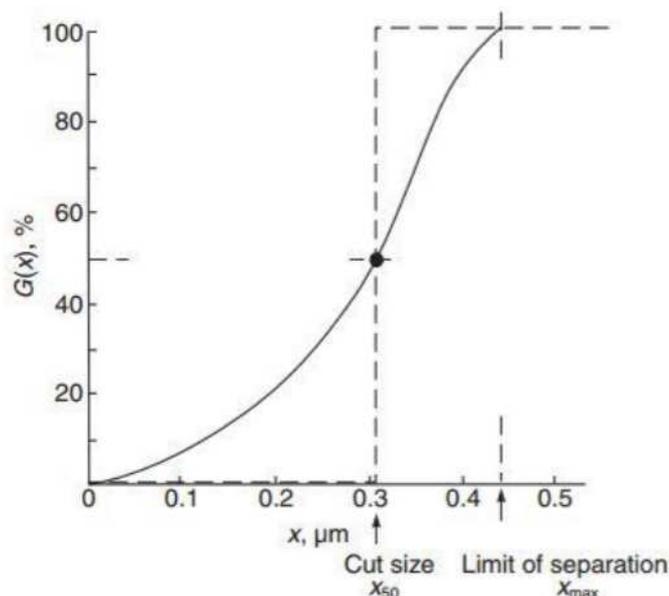
A eficiência de classificação ( $G(x)$ ), segundo SVAROVSKY (2000), é dada por:

$$G(x) = \frac{M_c \frac{dF_c}{dx}}{M \frac{dF}{dx}} \quad (6)$$

Onde  $M_c$  é a vazão mássica da suspensão em uma saída determinada (*underflow* ou *overflow*) do hidrociclone (kg/s);  $dF_c/dx$  é a distribuição de frequência do material particulado na saída determinada;  $M$  é a vazão mássica da suspensão de alimentação (kg/s) e  $dF/dx$  é a distribuição de frequência do material particulado na alimentação.

A Equação 6 resolvida para cada tamanho de partícula  $x$ , é representada em um gráfico de frequência acumulada, no qual cada tamanho de partícula apresenta uma certa probabilidade de se separar da suspensão. A Figura 10, mostra o gráfico da eficiência de classificação em função do tamanho da partícula.

Figura 10 – Eficiência de classificação para um hidrociclone.



Fonte: SVAROVSKY (2000).

O gráfico de eficiência de classificação pode ser chamado de curva de partição de probabilidade, pois ele mostra a probabilidade de um tamanho específico de partícula de se separar da suspensão ou ser carregado por ela. Desse modo, o diâmetro de corte ( $x_{50}$ ) representa o tamanho de partícula que possui 50% de probabilidade de se separar da suspensão, já o limite de separação ( $x_{\text{max}}$ ), representa o maior tamanho de partícula que se separou da suspensão alimentada (SVAROVSKY, 2000).

A forma ideal do gráfico da Figura 10 seria uma função passo, que representaria a separação de apenas um valor específico de diâmetro de partícula, seria a classificação perfeita, ou seja, quanto mais inclinada é a função  $G(x)$ , maior é a potencialidade de classificação do hidrociclone.

Outra maneira de avaliar a potencialidade de classificação é pelo diâmetro de corte ( $x_{50}$ ), que quanto menor for seu valor, maior será as probabilidades de separação das partículas com menores diâmetros.

Em operações nas quais os hidrociclones estão operando com correntes de saída diluídas, a avaliação da capacidade de separação precisar ser isolado da quantidade de líquido em excesso, uma vez que nesses casos sempre terá uma quantidade significativa de líquido acompanhando o material a ser separado.

Isso é necessário pois a eficiência da separação está na quantidade que o hidrociclone consegue separar de material em uma de suas saídas em relação a

quantidade do mesmo na entrada, ou seja, o quanto o equipamento consegue concentrar o material e não separá-lo totalmente do líquido.

Portanto, isso se faz modificando as Equações 5 e 6 com a introdução do fator  $R_f$ , que é a razão entre a vazão volumétrica da suspensão na saída que ocorre a descarga de sólidos (*underflow* ou *overflow*), em  $m^3/s$ , e a vazão volumétrica da suspensão diluída na alimentação, em  $m^3/s$ .

$$E'_T = \frac{E_T - R_f}{1 - R_f} \quad (7)$$

Onde  $E'_T$  é a eficiência total reduzida.

Do mesmo modo, para essa situação em particular, se ajusta a eficiência de classificação,  $G(x)$ , tornando a Equação 6 reduzida, de maneira semelhante à Equação 7.

$$G'(x) = \frac{G(x) - R_f}{1 - R_f} \quad (8)$$

Dessa maneira, é possível obter as eficiências de separação sem que o excesso de líquido, inerente de algum processo em particular, atrapalhe a avaliação do desempenho operacional do hidrociclone.

De acordo com BRADLEY (1965), as variáveis que influenciam a capacidade de separação de um hidrociclone são as **variáveis de design**, ou seja, suas dimensões, como: diâmetro da parte cilíndrica, diâmetros do *underflow* e *overflow*, comprimento total do equipamento, comprimento do *vortex finder* e ângulo da seção cônica; e as **variáveis de operação**, que são independentes das dimensões, sendo: vazão de alimentação, concentração de sólidos na alimentação, dimensão e forma dos sólidos, densidade dos sólidos e do meio fluido, além da viscosidade do meio fluido.

O autor ainda explica que os três critérios de avaliação da performance operacional são: a eficiência de separação total, a eficiência de classificação, queda de pressão e razão entre o *underflow* e *overflow*.

### 3.4.1 - Estudos com as variáveis de design

A influência das variáveis de design na performance de um hidrociclone são bastante estudadas na literatura, pois sua eficiência de separação está diretamente ligada às suas dimensões, por ser elas que irão direcionar a suspensão no sentido de gerar uma força motriz centrífuga seguido de uma força motriz espiral ascendente que irá direcionar a separação da suspensão alimentada.

Portanto, avaliar o comportamento dessas variáveis, permite melhorar a capacidade de separação e classificação de um hidrociclone, além de contribuir para a minimização de dois defeitos desse equipamento.

Esses defeitos do hidrociclone são inerentes ao seu caráter probabilístico de separação da corrente de alimentação, que são: o *by pass* das partículas finas (entre 1 e 15  $\mu\text{m}$ ) e o *by pass* das partículas grossas (acima de 20  $\mu\text{m}$ ).

O primeiro defeito, é devido ao fato das partículas finas não terem força de arraste suficiente para resistirem contra o fluxo da suspensão e são carregadas, logo uma parte delas são descarregadas no *underflow* junto com o líquido residual (usualmente água) e com a maioria das partículas grossas.

O segundo defeito, é quando parte das partículas grossas vencem a camada limite gerada pelo vórtex ascendente, atravessando-a e saindo pelo *overflow*, chamado efeito curto circuito (DELGADILLO e RAJAMANI, 2007).

Com o objetivo de minimizar o *by pass* das partículas finas, ajustes nos diâmetros das saídas do *overflow* e *underflow* devem ser feitos de maneira que o primeiro sempre deve ser maior que o segundo, de maneira a deixar a velocidade tangencial suficiente para haver uma eficiência de classificação satisfatória.

Desta maneira, diminuindo o diâmetro do *underflow* e aumentando o diâmetro do *overflow*, a quantidade de água direcionada para o *underflow* em relação a quantidade direcionada para o *overflow*, diminui, o que diminui o arrasto das partículas finas para a saída do *underflow* e conseqüentemente o seu *by pass* (MOUSAVIAN e NAJAFI, 2009; SVAROVSKY, 2000).

Já para minimizar o *by pass* das partículas grossas, um certo comprimento do *vórtex finder* precisa ser dimensionado, ao ponto de que sua parede impeça que essas partículas atravessem a camada limite do vórtex ascendente, forçando-as a seguirem o campo centrífugo que as direciona para as paredes da parte cilíndrica e em seqüência para o *underflow*.

As partículas finas também sofrem com o efeito do curto circuito e passam diretamente para o *overflow*, em tamanhos menores do *vortex finder*, aumentando sua eficiência de classificação. Então, é necessário avaliar qual tamanho de partícula se quer recuperar, se são as mais finas ou as mais grossas para um melhor ajuste das dimensões do *vortex finder* (WANG e YU, 2008).

As funções de cada uma das partes componentes do corpo do hidrociclone podem então ser pontuadas da seguinte maneira: os orifícios de alimentação e *overflow* juntamente com o comprimento do *vortex finder*, controlam a separação de tamanho das partículas e a queda de pressão, já o orifício do *underflow* controla a vazão do sistema (BRADLEY, 1965).

Mais estudos são apresentados a frente, mostrando os resultados de diversos autores sobre as influências das variáveis de design na performance de separação dos hidrociclones. A partir desses estudos, é possível extrair informações importantes sobre como manipular essas variáveis no momento do desenvolvimento do separador da suspensão de hidratos, no qual é o foco do presente projeto.

RIETEMA (1961) estudou a influência das variáveis de design na capacidade do hidrociclone de separar uma suspensão de água com frações finas de quartzo. Em seu estudo ele concluiu que as proporções geométricas que levaram a uma eficiência total ótima, foram:  $L/D = 5$ ;  $D_i/D = 0,28$ ;  $D_o/D = 0,34$  e  $D_u = 20$  mm. Em que  $L$  é o comprimento total do hidrociclone;  $D$  é o diâmetro da parte cilíndrica, sendo de 75 mm;  $D_i$  é o diâmetro de alimentação;  $D_o$  é o diâmetro do *overflow* e  $D_u$  é o diâmetro do *underflow*.

Para as proporções que levaram à uma eficiência de classificação ótima, ou seja, menor diâmetro de corte, o autor encontrou:  $L/D = 2,5$ ;  $D_i/D = 0,14$ ;  $D_o/D = 0,14$  e  $D_u = 20$  mm e comprimento do *vortex finder* em relação ao diâmetro da parte cilíndrica igual à 0,4.

Em seus estudos, KELSALL (1953), utilizou uma suspensão em condições de quase diluição infinita com água e esferas de acrílico de densidade  $1,18 \text{ g/cm}^3$ , para ser separada em um hidrociclone.

A investigação do autor consistiu na verificação da influência do diâmetro de alimentação, diâmetro do *overflow* e o comprimento do *vortex finder* sobre a eficiência de classificação do equipamento.

Segundo ele, para um hidrociclone de comprimento igual a 76,2 mm (3 polegadas), o diâmetro de alimentação que leva a melhor eficiência de separação para todos os diâmetros de partícula, é igual a 6,35 mm (0,25 polegadas).

As partículas finas (até 30,5  $\mu$ ), tem sua recuperação aumentada com a diminuição do diâmetro de *overflow*, mantendo as outras dimensões fixas, já as partículas grossas (acima de 50  $\mu$ ), tem sua recuperação aumentada com a diminuição do diâmetro do *overflow*, até um certo valor, depois há uma queda na mesma, com a contínua diminuição do diâmetro do *overflow*.

Em relação ao comprimento do *vortex finder*, o autor reportou que, com a sua diminuição, há um aumento na eficiência de recuperação das partículas finas e uma diminuição apreciável na eficiência de recuperação das partículas grossas.

Esse perfil se dá pelo efeito de curto circuito, no qual parte das partículas grossas passam direto para o *overflow*, após entrarem no hidrociclone, enquanto elas deveriam ir para o *underflow*.

Os autores WANG e YU (2008) aplicaram a técnica de CFD para simular a separação de uma suspensão de partículas de calcário, de densidade 2,7 g/cm<sup>3</sup>, com água através de um hidrociclone de 75 mm de diâmetro de corpo, avaliando a influência das dimensões do *vortex finder* na sua eficiência de classificação.

A diminuição no comprimento do *vortex finder*, de 50 mm para 0 mm, resultou em uma diminuição na eficiência de classificação de aproximadamente 10% para as partículas grossas (com tamanhos entre 40 e 70  $\mu$ ). Para as partículas com tamanhos entre 1 e 10  $\mu$  (finas), essa mesma diminuição no *vortex finder* causou um aumento na eficiência de classificação de aproximadamente 12%.

A diminuição no diâmetro do *vortex finder* ou *overflow*, de 25 mm para 10 mm, resultou em um aumento na eficiência de classificação entre 40 e 70 % para as partículas finas e um aumento para as partículas grossas entre 10 e 25 %.

Nos estudos de DELGADILLO e RAJAMANI (2007), foram investigados, por meio de simulações em CFD, a influência de 6 designs diferentes de hidrociclones na eficiência de classificação de partículas de calcário em suspensão aquosa a 4,8 % em massa.

Os resultados dos novos designs foram comparados com a eficiência de classificação do design padrão de hidrociclone de acordo com os autores HSIEH e RAJAMANI (1988).

Dois designs tiveram melhorias em relação ao padrão, em que o primeiro substituiu a parte cilíndrica do corpo do hidrociclone por outro cone, ficando dois cones de angulação 30 e 20° respectivamente, enquanto o outro teve o comprimento da parte cilíndrica do corpo reduzida de 75 mm para 50 mm, a adição de duas partes cônicas, uma de 20° de abertura e outra de 6°, além do comprimento total do hidrociclone aumentado em 270 mm.

A primeira modificação obteve um aumento em 50% na queda de pressão, o que levou a um aumento no campo centrífugo suficiente para aumentar a classificação melhor das partículas com tamanhos superiores a 20  $\mu\text{m}$  no *underflow*.

Porém, o *by pass* das partículas finas (inferiores a 10  $\mu\text{m}$ ) aumentou, que está aproximadamente relacionado com o aumento da descarga de água no *underflow* em 3% com relação ao design padrão.

Para o segundo design, a queda de pressão diminuiu devido a redução do ângulo do segundo cone, em concordância com os resultados também obtidos pelos autores MOUSAVIAN E NAJAFI (2009), mas mesmo assim a quantidade de descarga de água no *underflow* aumentou, o que conferiu um maior *by pass* para as partículas finas.

Mas, avaliando o gráfico de eficiência de classificação, em comparação com o design padrão, houve um aumento na sua inclinação, sendo assim, a consequência de uma classificação mais refinada no *underflow* para partículas com tamanhos acima de 20  $\mu\text{m}$ .

Utilizando também as dimensões padrões do hidrociclone de HSIEH e RAJAMANI (1988) como referência, os autores MOUSAVIAN E NAJAFI (2009) simularam a influência da vazão de alimentação, diâmetros do *overflow*, *underflow* e ângulo da parte cônica na eficiência de classificação de partículas de calcário em suspensão com água.

Diminuindo a vazão de alimentação de 1,5 kg/s para 0,4 kg/s, a eficiência de classificação diminuiu devido ao aumento do campo gravitacional em relação ao centrífugo, assim maior quantidade de água arrastando as partículas finas irão para o *underflow*, aumentando o *by pass* das mesmas e conseqüentemente diluindo a descarga nessa saída.

O contrário também foi testado pelos autores, em que dobrando a vazão de alimentação (3 kg/s), o campo centrífugo ficou tão forte ao ponto de direcionar praticamente toda suspensão para o *overflow*.

A influência dos diâmetros do *overflow* e *underflow* resultam em um aumento na eficiência de classificação quando o primeiro aumenta e o segundo diminui, o que também diminui o excesso de água no *underflow*.

Em relação ao ângulo da parte cônica, os autores reportaram que com a sua diminuição, curva de classificação fica mais acentuada, ou seja, melhor classificação de finos, porém o *by pass* dessas partículas aumenta, uma vez que a contração do cone direciona melhor as partículas finas para o vórtex ascendente, porém direciona maior quantidade de água para o *underflow*.

Nos estudos de VIEIRA *et. al.* (2011), foram avaliadas as influências das variáveis de design diâmetro do *overflow* e de entrada, comprimento do hidrociclone e ângulo da parte cônica na separação de uma suspensão de partículas de rocha de fosfato, com densidade de  $2980 \text{ kg/m}^3$ , e água.

As partículas seguem uma distribuição de frequência acumulada de acordo com o modelo de distribuição de Rosin-Rammler-Bennett, que pode ser encontrado nos capítulos 6 e 2 dos autores BRADLEY (1965) e SVAROVSKY (2000) respectivamente.

O trabalho foi também simulação em CFD e os autores encontraram valores mínimos para a queda de pressão e diâmetro de corte do hidrociclone com as seguintes dimensões, em função do diâmetro da parte cilíndrica:  $D_i/D_c = 0,26$ ;  $D_o/D_c = 0,22$ ;  $L/D_c = 6,9$  e  $\theta = 11,2^\circ$ . Em que,  $D_i$  é o diâmetro de entrada (m);  $D_o$  é o diâmetro do *overflow* (m);  $L$  é o comprimento total do hidrociclone (m) e  $\theta$  é o ângulo da parte cônica em graus ( $^\circ$ ).

Através dos estudos na literatura, é possível então tirar algumas conclusões sobre a influência das variáveis de design na performance de um hidrociclone, sendo elas:

- Para diminuir o *by pass* dos finos e dos grossos, menores tamanhos no diâmetro do *underflow* e maiores no diâmetro do *overflow*, são necessários, sendo que o *overflow* nunca deve ser menor que o *underflow*;
- A diminuição no ângulo do cone tem a função de melhorar a recuperação das partículas finas no *overflow*, porém com essa alteração, a quantidade de água que é direcionada para o *underflow* em relação ao *overflow* aumenta, arrastando mais partículas para a descarga inferior do equipamento, recuperando mais partículas grossas, mas conseqüentemente arrastando mais partículas finas também, então essa alteração no ângulo do cone para recuperar mais finos deve

- ser seguida da alteração nos diâmetros do *overflow* e *underflow*, para corrigir o *by pass* dos finos;
- O comprimento total do hidrociclone é um fator de controle do tempo de residência que interfere diretamente na probabilidade de separação da corrente de alimentação;
- Uma diminuição na vazão de alimentação, ou seja, aumento do bocal de entrada, diminui a eficiência de classificação, uma vez que o campo gravitacional aumenta em relação ao centrífugo;
- A alteração no comprimento do *vortex finder* também controla o *by pass* das partículas que ocorre na entrada do hidrociclone, sendo que menores tamanhos do mesmo, pode levar a maiores eficiências de classificação para as partículas finas, porém há um aumento no *by pass* das partículas grossas, então um comprimento adequado dessa variável de design deve ser estudado.

### 3.5 – Fluidodinâmica computacional e modelagem matemática

A Fluidodinâmica Computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) promove um meio de se determinar perfis de variáveis de interesse dentro de geometrias pré-determinadas, variáveis como: velocidade, pressão, fração mássica e temperatura, dentro de uma grande variedade de condições operacionais.

No início dos anos 80, as equações de Navier-Stokes (transporte de momentum), equações fundamentais que descrevem o deslocamento dos fluidos, começaram a entrar nas análises operacionais dos ciclones, um estudo que rapidamente evoluiu, devida a melhor compreensão sobre a turbulência no interior desses equipamentos e as proporções geométricas que levam a uma máxima eficiência de separação (MOUSAVIAN e NAJAFI, 2007).

Vários autores têm reportado estudos sobre a eficiência da técnica CFD em prever o perfil de escoamento no interior dos ciclones, além de se conseguir prever sua eficiência de separação, sendo possível melhorar a compreensão da física por trás desse equipamento, além de otimizar suas dimensões para um determinado processo de separação.

Tudo isso se mostra possível de realizar dispensando altos gastos com experimentos e tempo de campo (COKLJAT *et. al.*, 2006; HUANG, 2005; SLACK *et.*

*al.*, 2000; MOUSAVIAN e NAJAFI, 2007, 2009; WANG e YU, 2008; DELGADILLO e RAJAMANI, 2005, 2007; RAZIYEH e ATAALLAH, 2014).

A modelagem dos sistemas fluidodinâmicos consiste, inicialmente, na descrição do deslocamento, no espaço e no tempo, dos componentes do sistema, através equações fundamentais de conservação de massa, momentum e energia. Além das equações fundamentais, existem as equações complementares, que visam melhorar a descrição da física do sistema no sentido de aproximá-lo ao máximo do comportamento real.

Dentre as equações complementares, algumas são mais utilizadas nas simulações, como: equações para descrever turbulência (exemplo: RANS; modelo  $\kappa$ - $\epsilon$ ;  $\kappa$ - $\epsilon$  RNG; RSM; LES), equações para computar a posição de partículas (exemplo: modelo Lagrangiano de computar posição de partículas), equações para descrever a força de arrasto de um fluido sobre uma superfície (exemplo: modelo de Schiller-Naumann para esferas rígidas e o modelo de GRACE *et. al.* (1976) para esferas elípticas), entre outros modelos.

É de suma importância a escolha dos modelos complementares e das condições de contorno em uma simulação fluidodinâmica, para a mesma se definir confiável de interpretações. Auxiliando a escolha cuidadosa dos modelos que melhor definem o sistema a ser trabalhado, segue a validação da simulação, que consiste em reproduzir dados experimentais no sentido de ter certeza da sua confiabilidade.

O presente trabalho tem, como base, o dimensionamento de dois hidrociclones, ou seja, haverá duas modelagens, sendo o primeiro para separar o gás da lama (água + hidrato) e o segundo para separar a água do hidrato, com posterior investigação da influência das variáveis de design na eficiência de separação do hidrociclone.

### 3.5.1 Equações de conservação de massa e momentum

Serão abordadas apenas as equações de conservação de massa e momentum, uma vez que o sistema estudado neste trabalho apresenta uma distribuição de temperatura uniforme e constante.

As equações fundamentais de conservação são obtidas fazendo um balanço de massa e quantidade de movimento (momentum) em um volume de controle infinitesimalmente pequeno, que é a célula da malha computacional gerada sobre a geometria estudada. Esse volume de controle pode ser melhor visualizado na Figura 11.

O balanço de massa é calculado de acordo com a Equação 9, em que o acúmulo de massa no volume de controle é a diferença entre o somatório de todas as fontes de entrada de massa e o somatório de todas as suas fontes de saída.

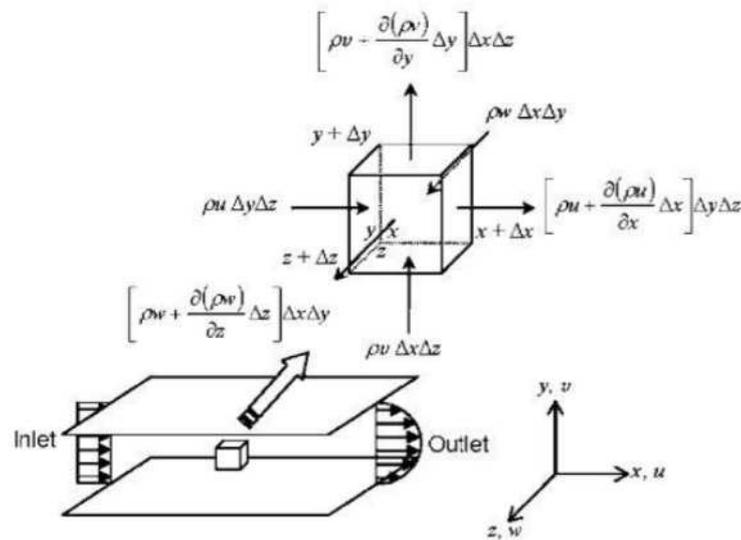
Já para o balanço de momentum, aplica-se a Segunda Lei de Newton, Equação 10, em que o acúmulo de velocidade dentro do volume de controle é gerado pelo somatório de todas as fontes de força atuantes nas três direções cartesianas ( $x, y, z$ ).

$$\frac{dm}{dt} = \sum \dot{m}_{entrada} - \sum \dot{m}_{saída} \quad (9)$$

$$\sum \vec{F} = m \frac{d\vec{u}}{dt} \quad (10)$$

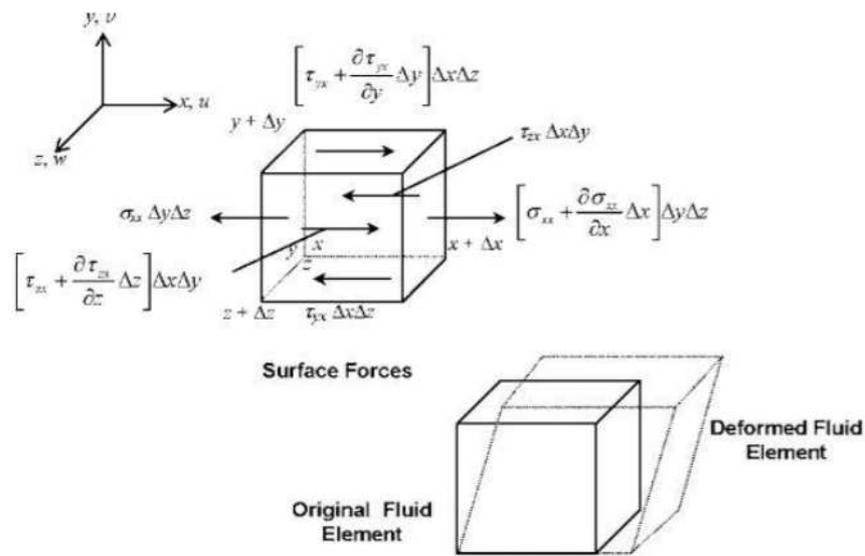
Em que,  $m$  é a massa (kg);  $\dot{m}$  é a vazão mássica (kg/s);  $\vec{F}$  é o vetor força (N) e  $\vec{u}$  é o vetor velocidade (m/s).

Figura 11 – Conservação de massa (A) e momentum (B) dentro de um volume de controle infinitesimalmente pequeno.



(A) – Fluxos de massa no volume de controle.

Continuação da Figura 11

(B) – Geração de tensão normal ao eixo ( $\sigma$ ) e tensão de cisalhamento ( $\tau$ ).Fonte: TU *et. al.* (2013).

A partir da Figura 11.A é possível observar os fluxos de massa passando pelo volume de controle, o que é possível, após alguns rearranjos matemáticos, descrever a equação de conservação de massa, conhecida como equação da continuidade, levando em consideração um sistema sem a presença de reação química, ou seja, sem a presença de taxa de geração de produtos e consumo de reagentes (TU *et. al.*, 2013).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left( \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right) \quad (11)$$

A Equação 11 pode ser reescrita com o operador de gradiente, ficando:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \vec{u}) \quad (12)$$

Em que,  $\rho$  é a massa específica do fluido ( $\text{kg/m}^3$ );  $t$  é o tempo em segundos;  $\nabla$  é o operador de gradiente que descreve a variação do vetor velocidade  $\vec{u}$  (m/s) ao longo do espaço cartesiano  $\left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)$ , no qual  $u$  representa a componente da velocidade no eixo  $x$ ,  $v$  no eixo  $y$  e  $w$  no eixo  $z$ .

Para um sistema multifásico, a Equação 12 ainda é reescrita em função da fração volumétrica de um dos componentes ou fases ( $\alpha_k$ ), ficando:

$$\frac{\partial(\rho\alpha_k)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho\alpha_k \bar{u}) \quad (13)$$

Do qual,  $\alpha_k$  é obtido pelo limite expressado pela Equação 14.

$$\alpha_k = \lim_{\Delta V \rightarrow \Delta V_o} \frac{\Delta V_k}{\Delta V} \quad (14)$$

Em que  $\Delta V$  (m<sup>3</sup>) é um volume amostral do sistema;  $\Delta V_o$  (m<sup>3</sup>) é um volume suficientemente pequeno, onde há um número mínimo de partículas do componente  $k$  que garantem variações insignificantes de suas propriedades físicas e  $\Delta V_k$  (m<sup>3</sup>) é o volume do componente  $k$ .

Segundo a distribuição de Poisson, o número mínimo de moléculas de um componente que levará a flutuações menores que 1% em suas propriedades físicas, é de 10<sup>5</sup>, que seria a quantidade de moléculas que devem estar presentes no volume de controle (CROWE *et al.*, 2012).

Analisando pelo sentido físico da Equação 13, é possível interpretar que a taxa de variação temporal da massa do componente  $k$ , é devido a convecção de massa que flui pelas superfícies do volume de controle mostrado pela Figura 11.A.

Através da Figura 11.B, é possível observar a geração de tensão normal e cisalhamento, que fazem parte da conservação de momentum, porém, além desses dois tipos de tensão viscosa, há ainda a presença da ação da gravidade, gradiente de pressão e forças de arrasto.

Essa última fonte de força está presente quando o fluido exerce uma força de atrito com as superfícies em que ele escoa, podendo ser superfície de partículas, bolhas, paredes do equipamento e entre outras mais, das quais formará uma camada de contato interfacial, chamada camada limite, devido ao atrito entre o fluido e a rugosidade da superfície.

Sabendo disso, é possível rearranjar a Equação 10 e modelar a ação das forças que atuam sobre o volume de controle mostrado na Figura 11.B, levando em consideração os três eixos cartesianos ( $x, y, z$ ), respectivamente (TING, 2016; CROWE *et al.*, 2012).

$$\begin{aligned} \rho g - \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \frac{1}{V} \sum F_D &= \rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \rho g - \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \frac{1}{V} \sum F_D &= \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (15) \\ \rho g - \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} + \frac{1}{V} \sum F_D &= \rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

Em que,  $g$  é a aceleração da gravidade ( $\text{m/s}^2$ );  $P$  é a pressão (Pa);  $\sigma$  e  $\tau$  são as tensões normal e de cisalhamento respectivamente (Pa) e  $F_D$  é a força de arrasto (N).

As Equações 15 podem ser reescritas utilizando o operador gradiente, ficando:

$$\rho g - \nabla \cdot P + \nabla \cdot \vec{\sigma} + \frac{1}{V} \sum F_D = \rho \left( \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u}(\nabla \cdot \vec{u}) \right) \quad (16)$$

Aplicando a Equação 16 para um sistema multifásico, tem-se:

$$\rho \alpha_k g - \nabla \cdot \alpha_k P + \nabla \cdot \alpha_k \vec{\sigma} + \frac{1}{V} \sum_k F_{Dk} = \rho \left( \frac{\partial(\alpha_k \vec{u})}{\partial t} + \vec{u}(\nabla \cdot \alpha_k \vec{u}) \right) \quad (17)$$

O sentido físico da Equação 17 é descrito a seguir para cada termo:

- $\rho \alpha_k g$  – Ação da aceleração gravitacional sobre o componente  $k$ , ou fase  $k$ ;
- $-\nabla \cdot \alpha_k P$  – Influência do gradiente de pressão sobre a fase  $k$ ;
- $\nabla \cdot \alpha_k \vec{\sigma}$  – Tensões de cisalhamento e normal que atuam deformando a fase  $k$  nos volumes de controle do sistema;
- $\frac{1}{V} \sum_k F_{Dk}$  – Somatório de todas as forças de arrasto que atuam sobre a fase  $k$  por unidade de volume de controle. Esse termo expressa a interação entre as fases  $k$  presentes no sistema multifásico, ou seja, o arrasto que uma fase exerce na outra, além de forças de atrito que estão presentes no sistema, como por exemplo o arrasto que as paredes do sistema exercem sobre a fase  $k$ .

- $\rho \frac{\partial(\alpha_k \bar{u})}{\partial t}$  – Aceleração da fase  $k$  causada pelas forças expostas do lado esquerdo da Equação 17;
- $\bar{\rho} \bar{u}(\nabla \cdot \alpha_k \bar{u})$  – Movimento de advecção, no qual uma corrente de fluido  $k$  é influenciada pela movimentação das outras correntes de fluido que a cruzam no espaço cartesiano. Por exemplo: uma corrente de fluido  $k$  no eixo  $x$  é “empurrada” pela movimentação das correntes de fluido  $k$  dos eixos  $y$  e  $z$  e assim por diante.

As tensões normais ( $\sigma$ ) e as tensões de cisalhamento ( $\tau$ ), podem ser modeladas para fluidos Newtonianos, como por exemplo: a água e o ar, donde Newton afirma que essas tensões são proporcionais ao gradiente de velocidade (BLAZEK, 2015). As tensões normais e de cisalhamento ficam então:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx} &= \lambda \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \\
 \sigma_{yy} &= \lambda \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \\
 \sigma_{zz} &= \lambda \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \\
 \tau_{xy} &= \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
 \tau_{xz} &= \tau_{zx} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\
 \tau_{yz} &= \tau_{zy} = \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)
 \end{aligned} \tag{18}$$

Em que  $\mu$  é a viscosidade dinâmica (Pa.s) do fluido e  $\lambda$  é denominada viscosidade volumétrica, ou viscosidade de dilatação volumétrica (Pa.s). Essa última propriedade física pode ser modelada segundo a relação de Stokes (BLAZEK, 2015), ficando:

$$\lambda + \frac{2}{3}\mu = 0 \tag{19}$$

A viscosidade volumétrica pode ser entendida como a capacidade do fluido de dissipar energia, em um meio de temperatura constante, durante uma taxa finita de dilatação do seu volume.

### 3.5.2 Abordagem Multifásica Euleriana – Euleriana

Essa abordagem conhecida também como modelo de dois fluidos, tem como fundamento a utilização das equações de Navier-Stokes aliadas à equação da continuidade, nas quais irão modelar a conservação de momentum e massa respectivamente, tanto para as fases dispersas (partículas ou bolhas) quanto para as fases contínuas (gases ou líquidos), uma vez que, nessa abordagem todas as fases são modeladas como sendo fluidos.

Em sistemas nos quais a fração volumétrica da fase dispersa é abaixo de 10%, a abordagem Lagrangiana de rastreamento individual de partículas é mais recomendada, na qual as equações de conservação de massa e momentum específicas para partículas são resolvidas individualmente para cada uma delas (SWAIN e MOHANTY, 2013).

Já para sistemas em que essa fração volumétrica é igual ou superior a 10%, a abordagem Euleriana-Euleriana é melhor aplicável, uma vez que a quantidade de partículas e/ou bolhas do sistema já estão em uma quantidade que exigiria um tremendo esforço computacional se aplicado o rastreamento Lagrangiano (COKLJAT *et. al.*, 2006)

Para a fase dispersa, partículas ou gotas, a Equação 17 é modificada, introduzindo termos constitutivos de momentum interfacial partícula/fluido, partícula/partícula e atrito com as paredes da geometria considerada. Esses termos são introduzidos em  $\frac{1}{V} \sum_k F_{Dk}$ , que na Equação 17 representa a influência de todas as forças de atrito presentes no sistema (Guia Teórico do Fluent 12.0, 2009; COKLJAT *et. al.*, 2006).

Na prática não é viável computar todas as forças que interferem o sistema a ser simulado, uma vez que isso aumenta a complexidade do sistema em um certo nível que leva bastante tempo para realizar a simulação, pode ocorrer de não atingir a convergência esperada e o ganho de precisão nos resultados não mostra ser significativo.

Por esses motivos, existem as simplificações dentro da modelagem matemática e a abordagem Euleriana-Euleriana traz importantes modificações utilizadas com frequência na literatura (VAN WACHEM *et. al.*, 1999; COKLJAT *et. al.*, 2006; VAKAMALLA e MANGADODDY, 2017; SWAIN e MOHANTY, 2013; AZIMIAN e BART, 2016).

Segundo o GUIA TEÓRICO DO FLUENT 12.0 (2009), o Modelo Euleriano (ME) apresenta sua estrutura complexa, porém sua precisão é uma das maiores na simulação multifásica. Ele modela separadamente todas as fases, mas com termos de acoplamento de massa e momentum nas equações, que levam em consideração a interação entre todas elas.

A limitação desse modelo se encontra na quantidade de fases a serem modeladas, uma vez que a memória computacional disponível precisa estar apta a armazenar todas as variáveis do sistema. Nesse ponto o Modelo de Mistura é mais flexível que o Modelo Euleriano, por modelar a conservação de momentum da mistura como todo, assim a utilização de memória é reduzida. Algumas características do ME são apresentadas a seguir:

- Uma única pressão é compartilhada para todas as fases;
- Os modelos para a continuidade e momentum são resolvidos para cada fase;
- Vários coeficientes de arrasto de interface estão presentes no pacote do Fluent para modelar todos os tipos de interação entre fases, sendo eles: fluido-fluido, fluido-sólido e sólido-sólido;
- Todos os modelos de turbulência  $\kappa - \epsilon$  estão disponíveis e podem ser aplicados para todas as fases.
- Os modelos de turbulência dos estresses de Reynolds não estão disponíveis para as fases;
- Rastreamento de partículas (Abordagem Lagrangiana) interage somente com a fase primária;
- Não se usa fluido invíscidos com o ME;
- Solidificação e liquefação não podem ser modelados com o ME;
- Não se usa DPM para rastrear as partículas juntamente com o ME, mas sim somente este último para modelá-las.

Para modelar a conservação de massa no ME, utiliza-se então a equação da continuidade multifásica, de acordo com a Equação 36. Assim, para a fase  $q$  a conservação de massa fica:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \bar{u}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q \quad (20)$$

Em que  $S_q$  é o termo fonte de massa para a fase  $q$ , que pelo programa Fluent é definido como sendo 0 pelo padrão, mas pode ser especificado pelo usuário.

A conservação de momentum para a fase  $q$  fica então:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \bar{u}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \bar{u}_q \bar{u}_q) = & -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \\ & \sum_{p=1}^n (\bar{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \bar{u}_{pq} - \dot{m}_{qp} \bar{u}_{qp}) + (\bar{F}_q + \bar{F}_{lift,q} + \bar{F}_{vm,q}) \end{aligned} \quad (21)$$

Em que,  $\bar{\tau}_q$  é o tensor de tensão-deformação da  $q$ ésima fase, definido por:

$$\bar{\tau}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \bar{u}_q + \nabla \bar{u}_q^T) + \alpha_q \left( \lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q \right) \nabla \cdot \bar{u}_q \bar{I} \quad (22)$$

Aqui,  $\mu_q$  e  $\lambda_q$  são as viscosidades cinemática e volumétrica, respectivamente, em Pa.s;  $\bar{I}$  é o momentum de inércia da fase  $q$  (kg.m<sup>2</sup>);  $\bar{F}_q$  é o vetor de uma força que atua externamente sobre a fase  $q$  (N/m<sup>3</sup>);  $\bar{F}_{lift,q}$  é a força de suspensão da fase  $q$  (N/m<sup>3</sup>);  $\bar{F}_{vm,q}$  é uma força virtual mássica (N/m<sup>3</sup>) e  $\bar{R}_{pq}$  é a força de interação entre o par de fases  $p$  e  $q$  (N/m<sup>3</sup>), onde ocorrerá a troca de momentum.

O termo  $\bar{u}_{pq}$  é a velocidade relativa da fase  $p$  com a  $q$  e é definida da seguinte maneira: se  $\dot{m}_{pq} > 0$ , então, massa da fase  $p$  está sendo transferida para a fase  $q$ , logo  $\bar{u}_{pq} = \bar{u}_p$ ; se  $\dot{m}_{pq} < 0$ , então, massa da fase  $q$  está sendo transferida para a fase  $p$ , logo  $\bar{u}_{pq} = \bar{u}_q$ . No mesmo sentido, se  $\dot{m}_{qp} > 0$ , então  $\bar{u}_{qp} = \bar{u}_q$  e se  $\dot{m}_{qp} < 0$ , então  $\bar{u}_{qp} = \bar{u}_p$ .

A Equação 21 deve ser encerrada com expressões apropriadas para o termo  $\bar{R}_{pq}$ , em que essa força depende da fricção, pressão, coesão, entre outros efeitos, e é sujeita as condições em que  $\bar{R}_{pq} = -\bar{R}_{qp}$  e  $\bar{R}_{qq} = 0$ .

O programa Fluent usa o seguinte termo de interação de momentum:

$$\sum_{p=1}^n \bar{R}_{pq} = \sum_{p=1}^n K_{pq} (\bar{u}_p - \bar{u}_q) \quad (23)$$

Do qual  $K_{pq}$  ( $= K_{qp}$ ) é o coeficiente de troca de momentum entre o par de fases  $p$  e  $q$ . Para cada interação do tipo fluido-fluido, fluido-sólido e sólido-sólido há uma expressão diferente que as descreve especificadamente, contidas na interface de especificações do sistema fluidodinâmico do programa Fluent.

Para a fluidodinâmica estudada neste trabalho, o termo  $K_{pq}$  da Equação 23 foi modelado de acordo com o modelo de Gidaspow, descrito pelo GUIA TEÓRICO DO FLUENT 12.0 (2009) na Equação 23-1. Esta equação é modelada para frações de líquido ou da fase contínua ( $\alpha_q$ ) superiores à 0,8.

$$K_{pq} = \frac{3}{4} \frac{24}{\alpha_q Re_p} [1 + 0,15(\alpha_q Re_p)^{0,687}] \frac{\alpha_p \alpha_q \rho_q |\bar{u}_p - \bar{u}_q| \alpha_q^{-2,65}}{d_p} \quad (23 - 1)$$

A força de arrasto, descrita pela Equação 23-1, juntamente com as fontes de força  $\vec{F}_{lift}$  e  $\vec{F}_{vm}$  da Equação 21 se tornam bastante influentes na modelagem multifásica sólido-líquido, quando a fase contínua rege a turbulência do sistema multifásico, ou seja, a concentração de sólidos possui um valor baixo para moderado (ex: aproximadamente de 2 a 30 % em volume) e a diferença de densidade entre as fases é relativamente baixa.

A força de suspensão ( $\vec{F}_{lift}$ ) age nas partículas e/ou bolhas devido aos gradientes de velocidade da fase fluida, sendo que quanto maior o diâmetro das partículas ou bolhas, maior é a influência dessa força na fluidodinâmica do sistema.

O modelo proposto pelo programa Fluent leva em consideração que o diâmetro das partículas e/ou bolhas seja muito menor do que o espaço por entre elas, desse modo,

o modelo não é apropriado para descrever sistemas com aglomeração de partículas ou com partículas extremamente pequenas.

A força de suspensão agindo sobre a fase particulada  $p$  em relação a fase fluida  $q$ , é:

$$\vec{F}_{lift} = -C_l \rho_q \alpha_p (\vec{u}_q - \vec{u}_p) \times (\nabla \times \vec{u}_q) \quad (24)$$

Sendo que essa força de suspensão é então adicionada no lado direito da Equação 21 para o par de fases  $p$  e  $q$  ( $\vec{F}_{lift,q} = -\vec{F}_{lift,p}$ ). Em que  $C_l$  é o coeficiente *lift*.

Neste trabalho se utilizou o modelo de Saffman-Mei (SAFFMAN, 1965, 1968; MEI e KLAUSNER, 1994) para descrever  $C_l$ , mostrado na Equação 24-1.

$$C_l = \frac{3}{2\pi\sqrt{Re_\omega}} C'_l \quad (24 - 1)$$

Em que  $C'_l$  é descrito por MEI e KLAUSNER (1994) de acordo com o intervalo de valor do número de Reynolds da partícula ( $Re_p$ ), representado por:

$$C'_l = \{6,46 \cdot f(Re_p, Re_\omega) \quad Re_p \leq 40 \quad (24 - 2)$$

$$C'_l = \{6,46 \cdot 0,0524(\beta Re_p)^{\frac{1}{2}} \quad 40 < Re_p < 100$$

Visto que  $Re_\omega$  é o número de Reynolds da vorticidade e  $Re_p$  é o número de Reynolds da partícula calculados por:

$$Re_\omega = \frac{\rho_q |\nabla \bar{x} \vec{V}_q| d_p^2}{\mu_q} \quad (24 - 3)$$

$$Re_p = \frac{\rho_q |\vec{V}_q - \vec{V}_p| d_p}{\mu_q} \quad (24 - 4)$$

De onde os termos  $f(Re_p, Re_\omega)$  e  $\beta$  podem ser descritos de acordo com MEI e KLAUSNER (1994):

$$\beta = 0,5 \left( \frac{Re_\omega}{Re_p} \right)$$

24 – 5

$$f(Re_p, Re_\omega) = (1 - 0,3314\beta^{0,5})e^{-0,1Re_p} + 0,3314\beta^{0,5}$$

Seguindo o assunto ainda com as forças de interação entre as fases, a força virtual mássica  $\vec{F}_{vm,q}$  influencia o sistema quando uma fase particulada e/ou bolhas, acelera em relação a fase fluida. A inércia da fase fluida gerada pelas partículas e/ou bolhas aceleradas, exerce uma “força virtual mássica” nas mesmas, descrita por:

$$\vec{F}_{vm} = 0,5\alpha_p\rho_q \left( \frac{d_q \bar{u}_q}{dt} - \frac{d_p \bar{u}_p}{dt} \right) \quad (25)$$

O termo  $\frac{d_q}{dt}$  a derivada da fase material em relação ao tempo na forma:

$$\frac{d_q \bar{u}_q}{dt} = \frac{d \bar{u}_q}{dt} + (\bar{u}_q \cdot \nabla) \bar{u}_q \quad (26)$$

Do mesmo modo  $\frac{d_p}{dt}$  fica:

$$\frac{d_p \bar{u}_p}{dt} = \frac{d \bar{u}_p}{dt} + (\bar{u}_p \cdot \nabla) \bar{u}_p \quad (27)$$

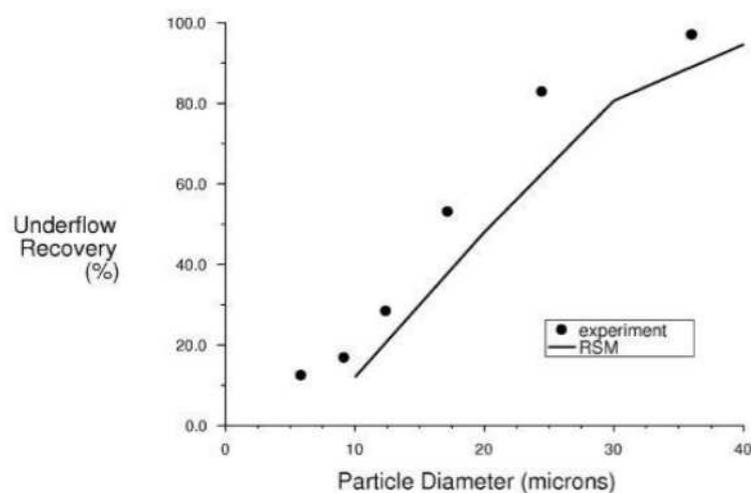
Dessa forma, a força virtual mássica é então adicionada ao lado direito da Equação 21 para o par de fases  $p$  e  $q$  ( $\vec{F}_{vm,q} = -\vec{F}_{vm,p}$ ). O efeito dessa força só estará presente significativamente quando a densidade da fase  $p$  é muito menor que a densidade da fase  $q$ , ou seja, é mais aplicada quando se trabalha com bolhas e/ou partículas que flutuam.

Alguns autores têm reportado a abordagem Euleriana-Euleriana como sendo bastante útil e aceitável no campo das simulações multifásicas em CFD, de acordo com os relatos a seguir.

COKLJAT *et. al.* (2006) utilizaram a abordagem Euleriana-Euleriana juntamente com o modelo de turbulência RSM (*Reynolds Stress Model*), para simular

através do Fluent 6.0, um sistema bifásico de água e partículas de calcário com concentração de 10,47% em massa, a ser separado em um hidrociclone de 75 mm de diâmetro. Outro detalhe da modelagem, os autores consideraram 6 fases, uma sendo a água, a segunda o ar e as outras 4 foram diferentes diâmetros de partículas de calcário. A Figura 12 mostra a comparação entre a eficiência de classificação experimental e simulada pelos autores.

Figura 12 – Comparação entre experimental e simulação da separação de uma suspensão de água e calcário a 10,47 % em massa por um hidrociclone de 75 mm de diâmetro.



Fonte: COKLJAT *et. al.* (2006).

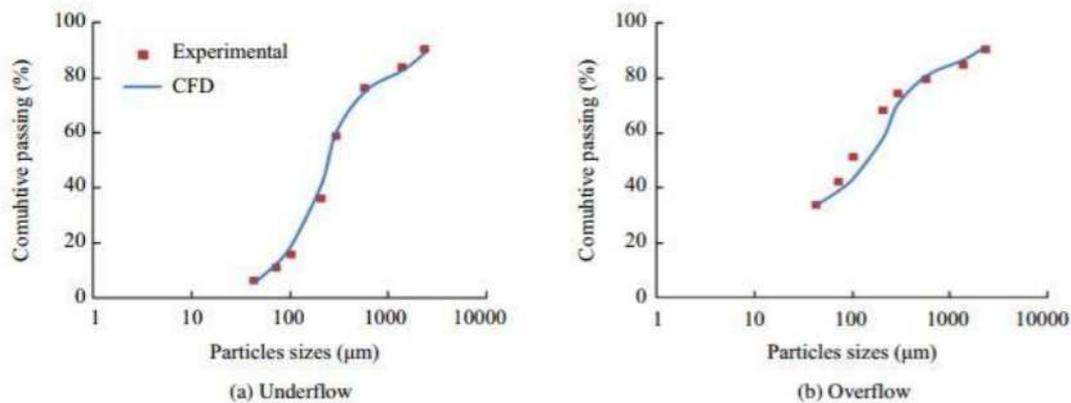
Se levados em conta os efeitos de medições experimentais da classificação da suspensão, da estabilidade e sensibilidade desse sistema de característica fortemente turbulenta, pode-se concluir que a simulação descreve corretamente o perfil de eficiência de classificação do hidrociclone mostrado na Figura 12.

Os autores RAZIYEH e ATAALLAH (2014) simularam a separação de uma suspensão de água e partículas com densidade de  $2700 \text{ kg/m}^3$  em um hidrociclone, sendo que foram consideradas 10 fases nesse caso, em que uma fase era a água (contínua) e as outras 9 fases dispersas eram diferentes diâmetros das partículas.

Os diâmetros das partículas considerados na simulação foram: 10, 40, 74, 105, 210, 279, 590, 1410 e  $2380 \mu\text{m}$ . Foi utilizado a abordagem Euleriana-Euleriana para as fases, juntamente com o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  RNG para a turbulência, donde as equações foram resolvidas no programa Ansys Fluent 12.0.

Os resultados das simulações dos autores RAZIYEH e ATAALLAH (2014), mostram uma boa concordância com os dados experimentais, podendo ser observado na Figura 13.

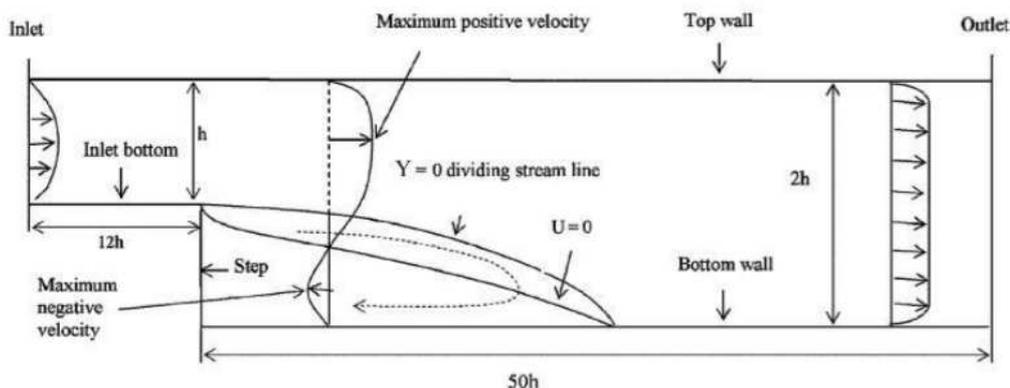
Figura 13: Comparação entre experimental e simulação da eficiência de classificação obtidos para o *underflow* e *overflow* do hidrociclone.



Fonte: RAZIYEH e ATAALLAH (2014).

Outros estudos, que utilizaram a abordagem Euleriana-Euleriana na simulação fluidodinâmica de sistemas com partículas, também obtiveram sucesso, como é o caso dos autores TIAN *et. al.* (2005). Os autores simularam um escoamento gás-sólido através de um tubo com degrau, em que  $h$ , mostrado na Figura 14, tem o valor de 0,025 m.

Figura 14: Representação do tubo por onde escoo o sistema gás-sólido.

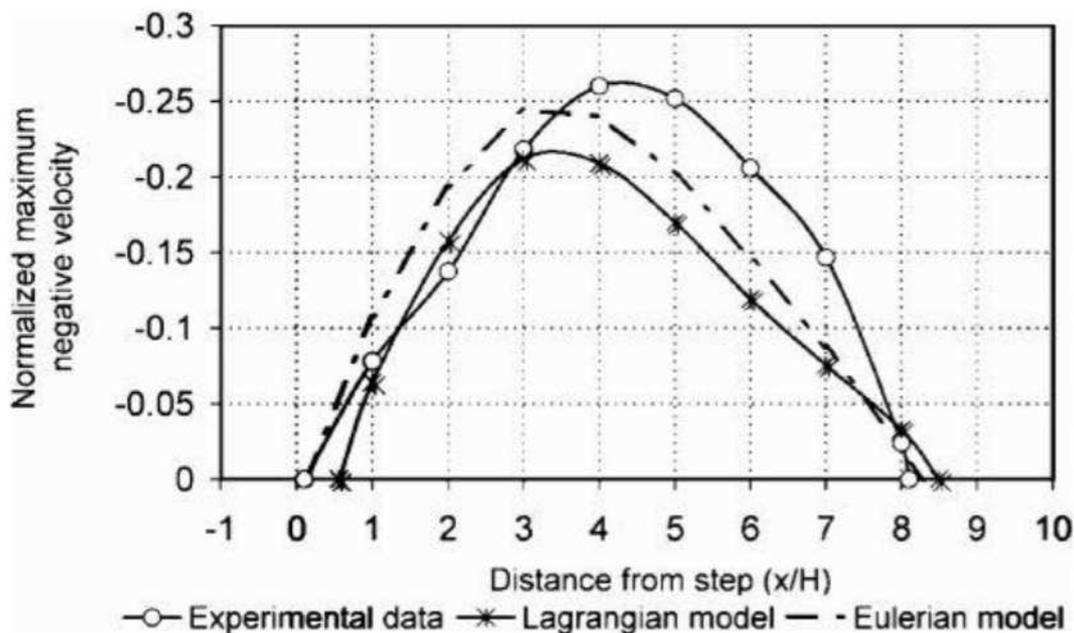


Fonte: TIAN *et. al.* (2005).

Os autores compararam a abordagem de dois fluidos (Euleriana) com a abordagem de rastreamento de partículas (Lagrangiana) na simulação do escoamento de gás e partículas de 1  $\mu\text{m}$  de diâmetro com densidade de  $810 \text{ kg/m}^3$ .

A comparação entre as duas simulações e os resultados experimentais, vista na Figura 15, mostram que a abordagem Euleriana-Euleriana mostrou-se mais precisa na predição da velocidade na zona de recirculação de partículas, representada pela seta pontilhada na Figura 14, situada no degrau do tubo.

Figura 15: Comparação entre a abordagem Euleriana e Lagrangiana na predição da velocidade máxima negativa (normalizada com a velocidade de entrada) na zona de recirculação de partículas.



Fonte: TIAN *et. al* (2005).

### 3.5.3 Métodos de obtenção de variáveis médias (*averaging*) e Turbulência

A viscosidade de um fluido consegue amortecer as perturbações causadas por um aumento de inércia do mesmo, em que a difusão molecular de momentum dissipa a energia cinética dessa perturbação, transformando-a em calor (aumento de energia interna do fluido) (TING, 2016; CROWE *et. al.*, 2012).

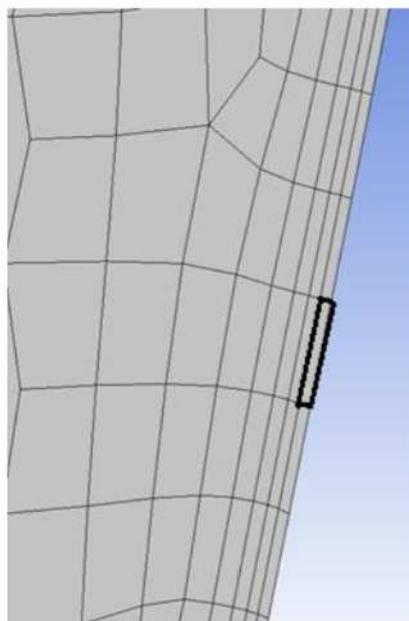
Porém, quando as perturbações geradas pelo aumento da inércia (valores de  $Re > 2300$ ), são maiores que o limite de dissipação pela viscosidade, a energia cinética passa a ser dispersada (espalha-se sem diminuir sua intensidade), causando flutuações no fluido, ou seja, gradientes de pressão e velocidade, que geram oscilações na tensão

de cisalhamento entre as lâminas de fluido e formam os turbilhões (TU *et. al.*, 2013; BLAZEK, 2015).

Como essa oscilação torna impossível o desenvolvimento de um modelo determinístico para a teoria da turbulência, existem várias abordagens na literatura que modelam o escoamento dos fluidos com o objetivo de se aproximarem ao máximo da realidade de cada sistema em específico. Cada modelo possui suas características que se aplicam melhor em determinados sistemas, assim não existe um modelo de turbulência superior ao outro.

Para a utilização satisfatória de um modelo de turbulência, alguns detalhes de fronteira da malha devem ser considerados, entre eles, o valor da distância adimensional da parede, ou valor  $Y^+$ . Essa distância adimensional é similar a um número de Reynolds local na parede, é a razão entre as influências turbulentas e laminares em uma célula adjacente à parede, de acordo com SALIM e CHEAH (2009), mostrada na Figura 16 em destaque negro.

Figura 16 – Fatia cuja espessura é o valor de  $Y^+$ .



Um valor adequado para o  $Y^+$  leva a uma computação mais precisa dos valores da velocidade ao longo da camada limite, determinando assim um perfil de velocidade correto ao longo das paredes do domínio fluidodinâmico. A Tabela 2 traz alguns intervalos de valores de  $Y^+$  que são definidos pela comunidade CFD como mais adequados.

Tabela 2 – Intervalo de valores de  $Y^+$  para cada modelo de turbulência.

Modelo	Intervalo de valores de $Y^+$
RSM	De 30 a 300
$\kappa$ - $\epsilon$	De 30 a 300
$\kappa$ - $\omega$	Menor ou igual à 1

Se o problema fluidodinâmico a ser resolvido depende fortemente do comportamento da velocidade e/ou temperatura na parede do sistema, uma camada limite bem refinada ( $Y^+$  menor ou igual à 1), deve ser implementado para uma melhor precisão de cálculo. Nesse sentido, o modelo SST  $\kappa$ - $\omega$  é recomendado para esse tipo de problema.

Para os demais problemas fluidodinâmicos, os modelos RSM e  $\kappa$ - $\epsilon$  são utilizados. Porém, quando há a presença de um grande núcleo com característica de tornado ou vórtex, o modelo RSM mostra-se mais adequado por computar todos as tensões viscosas presentes no escoamento e suas interações combinatórias entre os planos x, y, z.

No caso dos modelos RSM e  $\kappa$ - $\epsilon$ , o tratamento da velocidade próximo à parede é computado por uma função logarítmica de  $Y^+$ , que não se estende muito distante da parede do sistema para ser válida. Com a utilização dessa função, não se deve refinar a camada limite da malha para gerar um valor de  $Y^+$  inferior à 30, senão haverá computação errônea do perfil de velocidade próximo à parede, segundo o GUIA TEÓRICO DO FLUENT 12.0 (2009).

De acordo com os autores SALIM e CHEAH (2009), a região próxima à parede pode apresentar 3 zonas ou todas elas, cada uma com um determinado valor para  $Y^+$  adequado:

- Subcamada viscosa ( $Y^+ < 5$ );
- Região híbrida ou de transição, na qual há a interação de dois perfis de escoamento, um laminar e um turbulento ( $5 < Y^+ < 30$ );
- Região de turbulência ou região de lei logarítmica ou função logarítmica de  $Y^+$  ( $Y^+ > 30$  até aproximadamente 300).

Sabendo disso, para se escolher um modelo de turbulência mais adequado, deve-se analisar a física do problema, a precisão que se quer atingir, o tempo de simulação, a

capacidade computacional disponível e entre outras características específicas de cada problema. Nesse sentido, é interessante abordar sobre os modelos de turbulência mais comuns na resolução de problemas de CFD.

### **RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*)**

Avaliando essa flutuação na velocidade, Reynolds desenvolveu uma abordagem estatística baseada nas médias para a velocidade e pressão do fluido e as introduziu nas equações de Navier-Stokes, dando origem ao primeiro modelo de turbulência chamado RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) (TING, 2016).

Em um volume de controle infinitesimalmente pequeno ( $i$ ), a velocidade do fluido é monitorada em ciclos ( $N$ ). A cada volume de controle, a velocidade oscila, mas se um conjunto de volumes de controle for monitorados em  $N$  ciclos, o mesmo perfil das oscilações se repete, sendo possível calcular a média da velocidade no volume de controle dentro de  $N$  ciclos considerados, sendo:

$$\bar{u} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N u_{i,n} \quad (28)$$

Em que  $\bar{u}$  (m/s), é a velocidade média no volume de controle  $i$ , dentro de um número finito de ciclos  $N$ ;  $u_{i,n}$  é a velocidade instantânea dentro do volume de controle  $i$ .

A Equação 28, é um método que considera a oscilação temporal e espacial da velocidade ao mesmo tempo. Com isso, Reynolds modelou a abordagem RANS, que nada mais é uma modificação das Equações 13 e 17, considerando a média para a velocidade e pressão, além da adição do termo de estresse de Reynolds, descritos pelas Equações 29 e 30 (BLAZEK, 2015).

$$\frac{\partial(\rho\alpha_k)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho\alpha_k\bar{u}) \quad (29)$$

$$\rho\alpha_k g - \nabla \cdot \alpha_k \bar{P} + \nabla \cdot \alpha_k (\bar{\sigma} - \bar{\rho} u'_i u'_j) + \frac{1}{V} \sum_k F_{Dk} = \rho \left( \frac{\partial(\alpha_k \bar{u})}{\partial t} + \bar{u} (\nabla \cdot \alpha_k \bar{u}) \right) \quad (30)$$

A média da pressão ( $\bar{P}$ ) é dada pelo mesmo raciocínio da Equação 28. O termo  $\bar{\rho}u'_i u'_j$  da Equação 30 é chamado de tensor de estresse de Reynolds, em que o apóstrofo significa a flutuação da velocidade devido a turbulência, dada por:  $u' = u_{i,n} - \bar{u}$ . Considerando uma malha 3D, o tensor de estresse de Reynolds possui 9 componentes, 3 componentes para cada eixo das coordenadas cartesianas, descritos por:

$$\bar{\rho}u'_i u'_j = \begin{bmatrix} \rho(u')^2 & \rho u' v' & \rho u' w' \\ \rho v' u' & \rho(v')^2 & \rho v' w' \\ \rho w' u' & \rho w' v' & \rho(w')^2 \end{bmatrix} \quad (31)$$

Na Equação 31,  $u'$ ,  $v'$  e  $w'$  são as componentes das flutuações da velocidade devido a turbulência nos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente.

### Modelo $\kappa$ - $\epsilon$ padrão

Proposto inicialmente por Launder e Spalding, o modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  descreve a variação infinitesimal da energia cinética turbulenta ( $\kappa$ ) e sua dissipação ( $\epsilon$ ). É um modelo semi-empírico de duas equações que descrevem a geração de energia cinética devido aos gradientes de velocidade, flutuações na temperatura do fluido e efeitos da compressibilidade e dilatação do mesmo, além de computar a taxa de dissipação dessa geração (BLAZEK, 2015).

O modelo padrão  $\kappa$ - $\epsilon$  proposto por Launder e Spalding, é demonstrado pela Equação 32, que pode ser encontrado no GUIA TEÓRICO DO FLUENT 12.0 (2009), com a adaptação para sistemas multifásicos, sendo adicionada a fração volumétrica da fase  $k$  ( $\alpha_k$ ).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\alpha_k k) + \nabla \cdot \rho\alpha_k \bar{k}\bar{u} = \nabla \cdot \alpha_k \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla \cdot k \right] + G_k + G_b - \alpha_k \rho \epsilon - Y_M \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\alpha_k \epsilon) + \nabla \cdot \rho\alpha_k \bar{\epsilon}\bar{u} = & \nabla \cdot \alpha_k \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \cdot \epsilon \right] + \\ & C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \alpha_k \rho \frac{\epsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (33)$$

Aqui,  $k$  é a energia cinética específica turbulenta ( $\text{m}^2/\text{s}^2$ );  $\mu_t$  é a viscosidade dinâmica turbulenta (Pa.s) definida pela Equação 34;  $\epsilon$  é a taxa de dissipação turbulenta específica ( $\text{m}^2/\text{s}^3$ );  $G_k$  é a geração de energia cinética turbulenta pelo gradiente de velocidade, calculada pela Equação 35;  $G_b$  é a geração de energia cinética turbulenta pelas flutuações de temperatura, calculada pela Equação 36;  $Y_M$  é a contribuição das flutuações na dilatação quando se tem fluidos compressíveis, descrita pela Equação 37;  $\sigma_k = 1,0$  e  $\sigma_\epsilon = 1,3$  são os números de Prandtl turbulentos para  $k$  e  $\epsilon$  respectivamente;  $C_{1\epsilon}$  e  $C_{2\epsilon}$  são constantes empíricas que valem 1,44 e 1,92, respectivamente e  $C_{3\epsilon}$  pode ser obtido pela Equação 38.

Para a viscosidade turbulenta  $\mu_t$ , tem-se:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (34)$$

Em que,  $C_\mu$  é uma constante empírica da viscosidade dinâmica turbulenta que vale 0,09.

O termo da geração de energia cinética turbulenta pelo gradiente de velocidade é dado por:

$$G_k = -\alpha_k \bar{\rho} u_i u_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (35)$$

Aqui, os subscritos  $i$  e  $j$  significam as coordenadas cartesianas primária e secundária, respectivamente, em que  $i$  e  $j$  variam de 1 a 3, no qual 1 é o eixo  $x$ , 2 é o eixo  $y$  e 3 é o eixo  $z$ . Assim,  $\partial x_1 = \partial x$ ,  $\partial x_2 = \partial y$  e  $\partial x_3 = \partial z$ .

Para a geração de energia cinética turbulenta através de flutuações na temperatura, tem-se:

$$G_b = -\alpha_k \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p=cte} g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (36)$$

Na Equação 36,  $T$  é a temperatura em K;  $g_i$  a aceleração da gravidade na direção do eixo  $i$  em  $\text{m}/\text{s}^2$  e  $Pr_t$  é o número de Prandtl turbulento. Para um sistema com temperatura constante esse termo se anula.

Em sistemas nos quais o fluido está escoando com velocidades próximas a velocidade do som, há o efeito da dissipação da dilatação volumétrica do fluido, descrita pela Equação 37, em que  $a$  é a velocidade do som (m/s).

$$Y_M = 2\alpha_k \rho \epsilon \frac{k}{a^2} \quad (37)$$

Por último, resta o cálculo de  $C_{3\epsilon}$  da Equação 33, que se faz de acordo com a Equação 38:

$$C_{3\epsilon} = \tanh\left(\frac{v}{u}\right) \quad (38)$$

Em que,  $v$  é a componente da velocidade (m/s) paralela ao vetor da gravidade e  $u$  é a componente da velocidade (m/s) perpendicular ao vetor da gravidade.

### Modelo RNG $\kappa$ - $\epsilon$

O modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  é derivado das equações de Navier-Stokes, em que os autores YAKHOT e ORSZAG (1986) usaram uma técnica matemática chamada “Grupos de Renormalização” (*Renormalization Group*), que é implementada na resolução analítica da equação de transporte de momentum que resulta em constantes diferentes àqueles que aparecem no modelo padrão  $\kappa$ - $\epsilon$ , além de aparecer outros termos diferentes.

Esse modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  modificado resulta em melhores resultados, devido à inclusão do termo  $R_\epsilon$  na equação da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, que aumenta a precisão na simulação de fluxos com alto grau de turbilhonamento e deformação.

Similarmente ao modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  padrão, as equações do modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  possuem sua estrutura de acordo com as Equações 39 e 40, também encontrada no GUIA TEÓRICO DO FLUENT 12.0 (2009), com a adaptação para sistemas multifásicos utilizando a fração volumétrica da fase  $k$  ( $\alpha_k$ ).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \alpha_k k) + \nabla \cdot \rho \alpha_k \bar{k} \mathbf{u} = \nabla \cdot \alpha_k [\beta_k \mu_{eff} \nabla \cdot \mathbf{k}] + G_k + G_b - \alpha_k \rho \epsilon - Y_M \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\alpha_k\epsilon) + \nabla \cdot \rho\alpha_k\bar{\epsilon}\vec{u} = \nabla \cdot \alpha_k[\beta_\epsilon\mu_{eff}\nabla \cdot \epsilon] + \\ C_{1\epsilon}\frac{\epsilon}{k}(G_k + C_{3\epsilon}G_b) - C_{2\epsilon}\alpha_k\rho\frac{\epsilon^2}{k} - R_\epsilon \end{aligned} \quad (40)$$

Nas Equações 39 e 40 os novos termos que aparecem em relação ao modelo  $\kappa$ - $\epsilon$  padrão são:  $\beta_k$  e  $\beta_\epsilon$ , que são números de Prandtl efetivos inversos para a energia cinética turbulenta ( $k$ ) e sua dissipação ( $\epsilon$ ) e ambos valem aproximadamente 1,393;  $\mu_{eff}$  que é a viscosidade dinâmica efetiva do fluido devido a influência da escala dos turbilhões (Pa.s) e  $R_\epsilon$  que é o termo de ajuste para a dissipação turbulenta.

A viscosidade dinâmica efetiva ( $\mu_{eff}$ ) no modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  para grandes valores do número de Reynolds é obtida pela Equação 34, mas com o valor da constante  $C_\mu$  sendo 0,0845.

O termo adicional  $R_\epsilon$  pode ser calculado pela Equação 41, mostrada a seguir:

$$R_\epsilon = \frac{\alpha_k\rho C_\mu\eta^3\left(1 - \frac{\eta}{4,38}\right)\epsilon^2}{1 + 0,012\eta^3} \frac{1}{k} \quad (41)$$

Em que  $\eta$  é um parâmetro empírico de avaliação da magnitude da taxa de deformação do fluido. No momento em que a taxa de deformação do fluido for baixa,  $\eta < 4,38$ , o valor de  $C_{2\epsilon}$  na Equação 40 se torna maior do que esse mesmo parâmetro na Equação 33 do modelo padrão  $\kappa$ - $\epsilon$ .

Já para valores de  $\eta > 4,38$ , ou seja, quando o fluido estiver sobre alta taxa de deformação, o valor de  $C_{2\epsilon}$  na Equação 40 se torna menor do que esse mesmo parâmetro na Equação 33 do modelo padrão  $\kappa$ - $\epsilon$ . O reajuste do valor de  $C_{2\epsilon}$  pode ser feito implementando a Equação 41 na Equação 40, ficando:

$$C_{2\epsilon}^* = C_{2\epsilon} + \frac{C_\mu\eta^3\left(1 - \frac{\eta}{4,38}\right)}{1 + 0,012\eta^3} \quad (42)$$

Esses ajustes realizados pelo termo  $R_\epsilon$  dão a característica do modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  ser mais responsivo e preciso do que o  $\kappa$ - $\epsilon$  padrão, segundo o GUIA TEÓRICO DO FLUENT 12.0 (2009).

Os valores das constantes  $C_{1\epsilon}$  e  $C_{2\epsilon}$  no modelo RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  são: 1,42 e 1,68 respectivamente.

### Modelo RSM (*Reynolds Stress Model*)

Sendo o modelo de turbulência mais elaborado, O RSM modifica o modelo RANS, derivado das equações de Navier-Stokes para o transporte de momentum, no sentido de resolvê-la para os tensores de estresse de Reynolds, abordados na Equação 31.

No modelo RANS, o tensor de estresse de Reynolds aparece somente no termo da tensão viscosa da Equação 30, ou seja, considera que as flutuações no campo da velocidade irão alterar somente as tensões normais e de cisalhamento do fluido.

No modelo RSM, essas flutuações irão alterar todos os termos da Equação 30, juntamente com a influência de termos adicionais, pois esse modelo leva em conta efeitos de curvatura do fluxo modelado, vorticidade, e mudanças bruscas na taxa de deformação do fluido.

Porém, esse modelo apresenta desafios para ser resolvido, pois, termos como: a deformação pela pressão e taxa de dissipação da energia cinética turbulenta são modelagens semi-empíricas à parte, ou seja, apresentam uma certa limitação quanto a sua aplicação, devido a presença de constantes obtidas experimentalmente para determinados sistemas. A escolha dessas constantes na literatura é determinante para a precisão dos resultados preditos pelo modelo RSM.

A equação detalhada de transporte de momentum que inclui os tensores de estresse de Reynolds ( $\overline{\rho u'_i u'_j}$ ) pode ser encontrada nos estudos de LAUNDER *et. al.* (1975); GIBSON e LAUNDER (1978) e LAUNDER (1989)[1], demonstrada pela Equação 43, com a inclusão da fração volumétrica da fase  $k$  ( $\alpha_k$ ) para sistemas multifásicos.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \overline{\rho u'_i u'_j}) + C_{ij} = -D_{T,ij} + D_{L,ij} - P_{ij} - G_{ij} + \phi_{ij} - \epsilon_{ij} \quad (43)$$

Os termos da Equação 43 representados por letras maiúsculas e gregas podem ser identificados como:

- $C_{ij}$  – É o gradiente de velocidade que modela o fenômeno de advecção;

- $D_{T,ij}$  – Difusão turbulenta;
- $D_{L,ij}$  – Difusão molecular
- $P_{ij}$  – Produção de tensões no fluido;
- $G_{ij}$  – Produção de flutuações devido ao gradiente de temperatura;
- $\phi_{ij}$  – Deformação pela ação da pressão;
- $\epsilon_{ij}$  – Dissipação de energia cinética turbulenta;

Os termos  $C_{ij}$ ,  $D_{L,ij}$  e  $P_{ij}$  são modelados sem a presença de constantes empíricas, por outro lado, o restante dos termos ( $D_{T,ij}$ ;  $G_{ij}$ ;  $\phi_{ij}$  e  $\epsilon_{ij}$ ) necessitam de dados experimentais para serem modelados por completo. Aqui serão somente citados os trabalhos que se encontram a modelagem dos últimos 4 termos, devido à grande extensão dos mesmos.

Através da Tabela 3, os trabalhos dos autores que modelaram os 4 termos semi-empíricos, podem ser encontrados.

Tabela 3 – Trabalhos que contém a modelagem semi-empírica dos termos do modelo RSM.

Termos	Referências
$D_{T,ij}$	DALY e HARLOW (1970); LIEN e LESCHZINER (1994)
$G_{ij}$	GUIA TEÓRICO DO FLUENT 12.0 (2009); GIBSON e LAUNDER (1978)
$\phi_{ij}$	GIBSON e LAUNDER (1978); LAUNDER (1989)[1]; LAUNDER (1989)[2]; LUMLEY (1979); DONALDSON (1969)
$\epsilon_{ij}$	Modelo $\kappa$ - $\epsilon$ padrão (Equação 48); DONALDSON (1969); GIBSON e LAUNDER (1978)

Os termos  $C_{ij}$ ,  $D_{L,ij}$  e  $P_{ij}$  da Equação 43 são modelados de acordo com a sequência de Equações 44 a seguir:

$$\begin{aligned}
 C_{ij} &= \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\rho} \bar{u}'_i u'_j) \\
 D_{L,ij} &= \nabla \cdot [\alpha_k \mu \nabla \cdot (u'_i u'_j)] \\
 P_{ij} &= -\alpha_k \rho \left\{ \left[ u'_i \bar{u}'^j (\nabla \cdot u_j) \right] + \left[ u'_j \bar{u}'^i (\nabla \cdot u_i) \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{44}$$

Em que os índices  $i$  e  $j$  representam os eixos cartesianos primário e secundário respectivamente.

## 4 – METODOLOGIA

O desenvolvimento da pesquisa abrange uma primeira parte, sendo a validação do modelo fluidodinâmico proposto por este trabalho, no qual apresentou duas etapas e uma segunda parte que envolve a avaliação das variáveis de design dos hidrociclones na separação dos hidratos.

A construção de cada caso a ser simulado em CFD, segue um desenvolvimento de 5 etapas, da seguinte maneira:

### ► Criação das geometrias desejadas

Nesta etapa foi utilizado o *software* SpaceClaim da plataforma ANSYS versão 17.2 para a geração do primeiro lote das geometrias de validação e dos hidrociclones de separação dos hidratos.

### ► Geração das malhas computacionais

As malhas foram criadas pelo *software* Salome versão 8.3.0 e computadas para hexaédricas utilizando a plataforma de geração automática de malhas cfMesh, disponível na biblioteca de códigos terceirizados da ferramenta de cálculo numérico OpenFOAM versão 17.12.

### ► *Setup* e processamento

Os *setups* foram criados no *software* Fluent da plataforma ANSYS versão 17.2, de onde também foram processadas as simulações numéricas.

### ► Pós-processamento

Esta etapa consiste na visualização dos planos de corte e linhas de fluxo, dos quais é possível extrair os resultados sobre os campos de velocidade, pressão e concentração dos componentes do sistema simulado. Utilizou-se do visualizador gráfico

presente na seção de pós-processamento do Fluent 17.2 para gerar os campos das soluções das variáveis fluidodinâmicas.

As informações à respeito dos parâmetros e condições de contorno a serem definidos para as simulações da suspensão de água/hidratos contou com o apoio da equipe responsável pela produção dos hidratos, da qual os membros fazem parte do laboratório de produção dos hidratos, situado no bloco G da Faculdade de Engenharia Química da Unicamp.

Esta equipe realizou alguns testes experimentais e foi verificado que a suspensão efluente do reator NETmix® consiste em praticamente água e hidratos, a quantidade de gás não capturado pela estrutura cristalina dos hidratos é muito baixa, sendo assim não se considerou sua presença na composição da corrente de alimentação dos hidrociclones modelados neste trabalho. Considerou-se apenas uma corrente bifásica água/hidratos.

Os dados referentes à físico-química dos hidratos de CO<sub>2</sub> e hidratos de CH<sub>4</sub> foram pesquisados na literatura, pois até o momento não foram extraídos pela equipe experimental responsável.

#### 4.1 – Validação do modelo

Em um primeiro estágio, uma simulação para a validação do modelo matemático multifásico Euleriano – Euleriano, foi desenvolvida de acordo com o *setup* mostrado na Tabela 6. Essa simulação de validação está configurada com a geometria do hidrociclone presente no trabalho autores AZIMIAN e BART (2016) (Tabela 4 e Figura 17(a)).

Tabela 4 – Geometria do hidrociclone para validação.

Medida	Valor
Diâmetro da seção cilíndrica (mm)	75
Diâmetro de alimentação (mm)	22
Diâmetro do <i>vortex finder</i> ou <i>overflow</i> (mm)	22
Comprimento do <i>vortex finder</i> (mm)	50
Comprimento da seção cilíndrica (mm)	75
Diâmetro do <i>underflow</i> (mm)	11
Ângulo da seção cônica (°)	20

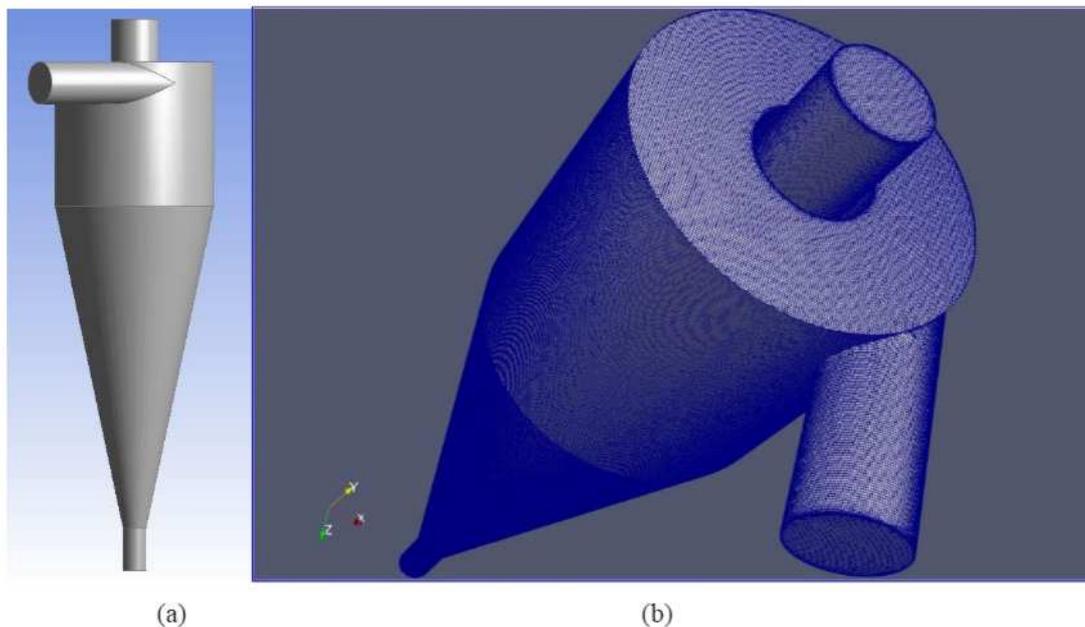
Fonte: AZIMIAN e BART (2016).

Considerando que a dinâmica de escoamento dentro do hidrociclone é complexa, foi implementado a malha hexaédrica para repartir a geometria do hidrociclone neste trabalho.

Segundo MALISKA (2004), esse tipo de malha traz uma melhor ortogonalidade das coordenadas cartesianas que irão melhorar a discretização das equações diferenciais fluidodinâmicas.

Como a geometria do hidrociclone traz uma certa irregularidade de superfície, principalmente nas regiões da descarga *overflow* e no tubo de alimentação, o tipo de malha não estruturada se adequa melhor à sua forma. Nesse sentido a malha hexaédrica não estruturada se mostra ser a melhor para repartir a geometria do hidrociclone, demonstrada na Figura 17(b).

Figura 17 – Geometria e malha cfMesh do hidrociclone de validação.



Os dados obtidos nas simulações desse trabalho, foram então comparados com os dados experimentais de HSIEH e RAJAMANI (1988), disponíveis no trabalho de Azimian e Bart (2016) e também com os dados simulados por esses dois últimos autores.

O sistema bifásico utilizado na simulação de validação é uma mistura de água (fase contínua) e 14,4 % em massa de partículas de areia (fase dispersa) com um tamanho médio de 33  $\mu\text{m}$  e densidade de 2300  $\text{kg/m}^3$ .

A velocidade de alimentação da suspensão água-areia é de 3,5 m/s, as pressões nas duas saídas do hidrociclone foram definidas no valor atmosférico padrão 101,325 kPa, já nas paredes, considerou-se uma rugosidade de 1,5  $\mu\text{m}$ . Os modelos de arrasto e *lift* atuantes na suspensão, são: Modelo de Gidaspow e Modelo Saffman-Mei, respectivamente (AZIMIAN e BART, 2016; SAFFMAN, 1965 e 1968; MEI e KLAUSNER, 1994; GUIA TEÓRICO DO FLUENT, 2009).

A viscosidade da partícula de areia foi determinada através da sequência das Equações 45, 46 e 48 descritas por AZIMIAN e BART (2016). A Equação 47 foi desenvolvida por THOMAS (1965), da qual mostram a influência da concentração de partículas sólidas na viscosidade dinâmica da suspensão, uma vez que esta sofre aumento significativo com o aumento da concentração dessas partículas.

THOMAS (1965) utilizou partículas esféricas uniformes em seu trabalho, com frações volumétricas desses sólidos de até 0,5. A variância do ajuste da Equação 47 não ultrapassou o valor de 0,152, mostrando ser um modelo que representa bem os dados experimentais da influência da concentração de partículas no valor da viscosidade dinâmica da suspensão.

$$\frac{1}{\rho_m} = \frac{W_p}{\rho_p} + \frac{(1 - W_p)}{\rho_f} \quad (45)$$

$$W_v = \frac{W_p \rho_m}{\rho_p} \quad (46)$$

$$\frac{\mu_m}{\mu_f} = 1.0 + 2.5W_v + 10.05W_v^2 + 0.00273e^{16.6W_v} \quad (47)$$

$$\mu_p = \frac{\mu_m - (1 - W_p)\mu_f}{W_p} \quad (48)$$

Em que:  $\rho_m$  é a densidade da mistura ( $\text{kg}/\text{m}^3$ );  $\rho_p$  é a densidade da partícula sólida ( $\text{kg}/\text{m}^3$ );  $\rho_f$  é a densidade do fluido ( $\text{kg}/\text{m}^3$ );  $W_p$  é a fração mássica das partículas sólidas;  $W_v$  é a fração volumétrica das partículas sólidas;  $\mu_m$  é a viscosidade dinâmica da mistura (Pa.s);  $\mu_f$  é a viscosidade dinâmica do fluido (Pa.s) e  $\mu_p$  é a viscosidade dinâmica das partículas sólidas (Pa.s).

Partindo da mesma simulação de validação já descrita, adotou-se um segundo método de validação, utilizando o modelo empírico de PLITT (1976), demonstrado na Equação 49 (NAGESWARARAO *et al.*, 2004).

$$d_{50c} = \frac{50,5 D_c^{0,46} D_i^{0,6} D_o^{1,21} e^{0,08 C_{V\%}}}{D_u^{0,71} h^{0,38} Q^{0,45} (\rho_s - \rho_l)^{0,5}} \quad (49)$$

Em que,  $d_{50c}$  é o diâmetro de corte da partícula ( $\mu\text{m}$ );  $D_c$ ,  $D_i$ ,  $D_o$  e  $D_u$ , são, respectivamente, o diâmetro do cilindro, o diâmetro de alimentação, o diâmetro do *overflow* e o diâmetro do *underflow* do hidrociclone (mm);  $C_{V\%}$  é o percentual volumétrico de partículas que alimentam o hidrociclone;  $h$  é a altura do vórtice livre, distância compreendida entre a saída *underflow* e a base do *vortex finder* (mm);  $Q$  é a vazão volumétrica da suspensão de alimentação (L/min);  $\rho_s$  e  $\rho_l$  são as densidade do sólido e do líquido respectivamente ( $\text{Kg/m}^3$ ).

Ao substituir os valores dos parâmetros da Equação 49, referentes ao hidrociclone de AZIMIAN e BART (2016), obtêm-se o valor para o diâmetro de corte deste equipamento (ver Tabela 5).

Tabela 5 – Parâmetros da Equação 49 para o hidrociclone descrito na Tabela 4.

Parâmetros	Valor
$D_c$ (mm)	75,00
$D_i$ (mm)	22,00
$D_o$ (mm)	22,00
$D_u$ (mm)	11,00
$C_{V\%}$	6,80
$h$ (mm)	192,00
$Q$ (L/min)	65,69
$\rho_s$ ( $\text{Kg/m}^3$ )	2300,00
$\rho_l$ ( $\text{Kg/m}^3$ )	998,20
$d_{50c}$ ( $\mu\text{m}$ )	17,76

O valor de 17,76  $\mu\text{m}$  para o diâmetro de corte das partículas de areia foi inserido no *setup* multifásico do hidrociclone de validação. O valor da razão entre a massa de areia no *underflow* pela massa de areia na alimentação do equipamento foi calculado para diversos tempos de simulação, sendo possível verificar se a recuperação do hidrociclone obedecia a teoria do diâmetro de corte, ou seja, o valor de  $d_{50c}$  que leva à recuperação de 50% em massa de areia.

## 4.2 – Estudo da influência das variáveis de design

Após a validação pelos dois métodos apresentados, o modelo multifásico (Tabela 6) foi implementado nas simulações de separação da suspensão água/hidrato.

Tabela 6 – Configuração das simulações através do FLUENT 17.2.

Parâmetro	Método
Tipo de <i>Solver</i>	<i>Pressure Based</i>
Modelo multifásico	Euleriano implícito
Modelo de Turbulência	RSM (GIBSON; LAUNDER,1978)
Reynolds-stress model	<i>Linear Pressure Strain</i>
Reynolds-stress options	<i>Wall Reflection Effects</i>
Near-wall treatment	<i>Standard Wall Functions</i>
RSM multiphase model	<i>Dispersed</i>
Modelo de Arrasto	Gidaspow com fator de arrasto Brucato
Modelo <i>Lift</i>	Saffinan-Mei
Condições de Contorno	
Zona	Tipo
Entrada	<i>Velocity-inlet</i>
<i>Overflow</i>	<i>Pressure-outlet</i>
<i>Underflow</i>	<i>Pressure-outlet</i>
Parede	<i>Wall = no-slip (para a fase contínua)</i> <i>Specified shear stress = 0 Pascal (para a fase dispersa)</i>
Método de Solução	
Acoplamento de Pressão e Velocidade	
Esquema	<i>Phase Coupled SIMPLE</i>
Discretização espacial	Esquema de interpolação
Gradiente	<i>Least Square Cell Based</i>
Momentum	<i>Second Order Upwind</i>
Fração Volumétrica	<i>QUICK</i>
Energia Cinética Turbulenta ( $\kappa$ )	<i>Second Order Upwind</i>
Taxa de dissipação turbulenta ( $\epsilon$ )	<i>Second Order Upwind</i>
Tensores de Reynolds ( $\overline{u'_i u'_j}$ )	<i>Second Order Upwind</i>
Critério de Convergência	
Resíduos	Abaixo de $1 \times 10^{-3}$
Regime	Transiente

Para avaliar a influência da geometria do hidrociclone na eficiência de separação da suspensão água/hidrato, foi desenvolvido um planejamento fatorial fracionário  $2^{4-1}$ , descrito na Tabela 7, em que 8 geometrias diferentes do equipamento foram modeladas, alterando o valor de 4 variáveis de design, sendo elas: diâmetro do *overflow* ( $D_o$ ); diâmetro do *underflow* ( $D_u$ ); comprimento do *vortex finder* ( $L_{vf}$ ) e comprimento total do hidrociclone ( $L$ ).

Tabela 7 – Planejamento fatorial  $2^{4-1}$  para as variáveis de design do hidrociclone de separação água/hidrato.

Hidrociclone	$D_o$ (mm)	$D_u$ (mm)	$L_{vf}$ (mm)	$L$ (mm)
1	6,35	4,76	10,45	50,96
2	11,43	4,76	10,45	91,73
3	6,35	8,57	10,45	91,73
4	11,43	8,57	10,45	50,96
5	6,35	4,76	17,35	91,73
6	11,43	4,76	17,35	50,96
7	6,35	8,57	17,35	50,96
8	11,43	8,57	17,35	91,73

As dimensões dos hidrociclones para separação primária dos hidratos apresentados na Tabela 7 foram desenvolvidas através da consulta de relações geométricas dos hidrociclones na literatura (RIETEMA, 1961; DELGADILLO e RAJAMANI, 2005, 2007; MOUSAVIAN e NAJAFI, 2009; WANG e YU, 2008; VIEIRA *et. al.*, 2011). Essas relações trazem a razão entre as variáveis de design e uma dimensão fixa do hidrociclone, geralmente o diâmetro da seção cilíndrica.

Para dimensionar os 8 hidrociclones da Tabela 7, a única variável fixa disponível foi o diâmetro de alimentação, no qual foi definido sendo igual ao diâmetro do tubo de saída do NETmix®, do qual escoam os hidratos formados. O valor dessa medida é de 4,5 mm.

As condições de contorno para a simulação de separação água/hidrato podem ser vistas na Tabela 8, as quais foram fornecidas pela equipe responsável pela síntese dos hidratos através do reator NETmix®.

Tabela 8 – Condições de contorno da separação água/hidrato.

Característica	Valor
Temperatura (°C)	5,00
Pressão de alimentação (kPa)	4053,00
Pressão de ambas as saídas (kPa)	101,32
Vazão de alimentação (L/s)	0,15
Fração volumétrica de hidratos	0,10
Diâmetro médio das partículas de hidrato ( $\mu\text{m}$ )	25,15

As propriedades físicas dos componentes do sistema podem ser vistas na Tabela 9, de forma que o valor da viscosidade dinâmica dos hidratos foi calculado pelo modelo de THOMAS (1965) descrito pela Equação 47.

Como a viscosidade e a densidade dos hidratos são dependentes apenas do tipo de estrutura na qual é formada no processo de síntese dos mesmos, tanto para o hidrato de  $\text{CO}_2$  quanto para o hidrato de  $\text{CH}_4$ , esses dois parâmetros são os mesmos, pois ambos os hidratos desses gases apresentam a mesma estrutura molecular (estrutura do tipo sI), segundo SLOAN e FLEYFEL (1992).

Tabela 9 – Propriedades físicas dos componentes do sistema a 4 °C.

Componente	Densidade ( $\text{kg/m}^3$ )	Viscosidade dinâmica (Pa.s)
Água	998,2 <sup>(1)</sup>	0,001003 <sup>(1)</sup>
Hidratos (Estrutura sI)	1100 <sup>(2)</sup>	0,008 <sup>(3)</sup>

<sup>(1)</sup> Base de dados do Fluent 17.2; <sup>(2)</sup> AYA *et. al.* (1997); BOZZO *et. al.* (1975); CHIALVO *et. al.* (2002); FERDOWS e OTA (2006); <sup>(3)</sup> THOMAS (1965).

## 5 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

Vale a pena lembrar que não se tem estudos publicados na literatura sobre esse tipo de suspensão de água/hidrato, tão pouco sobre a possível separação da mesma.

A investigação sobre a viabilidade de se utilizar um hidrociclone para separar a suspensão água/hidrato é inédita na comunidade científica. Nesse sentido, não há dados científicos publicados para se ter uma comparação real de como seria a separação da corrente água/hidrato pelo hidrociclone.

Esse trabalho tem a finalidade de inserir na comunidade científica um primeiro passo na pesquisa sobre a separação da suspensão água/hidrato e também sobre a sua fluidodinâmica.

Decorridos aproximadamente 3 segundos do tempo transiente de simulação, foi observado baixa variação no valor da magnitude da velocidade em relação ao tempo de simulação, sendo possível julgar que as simulações chegaram em um estado estável com relação às perturbações na magnitude da velocidade média computada.

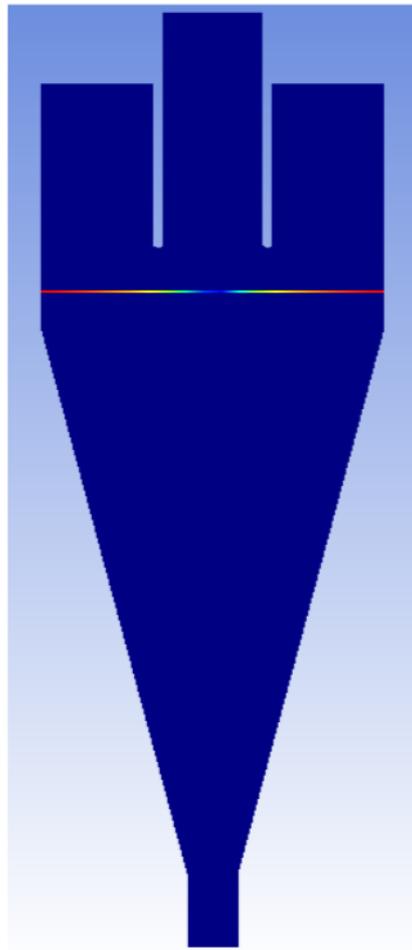
Os resíduos de cálculo para as equações da continuidade, quantidade de movimento, parâmetros de turbulência e fração volumétrica de hidrato não ultrapassaram o valor de  $9 \times 10^{-4}$ . Dessa maneira, a solução numérica do escoamento foi declarada convergida para cada passo de tempo de 0,001 s. Nesse momento então, foram extraídos os resultados apresentados nesse trabalho.

Os resultados deste trabalho investigativo estão separados em: análise dos dados de validação obtidos, análise estatística dos dados obtidos com as simulações dos 8 hidrociclones na separação da suspensão água/hidrato, assim como a análise de suas fluidodinâmicas.

### 5.1 – Validação do modelo fluidodinâmico proposto

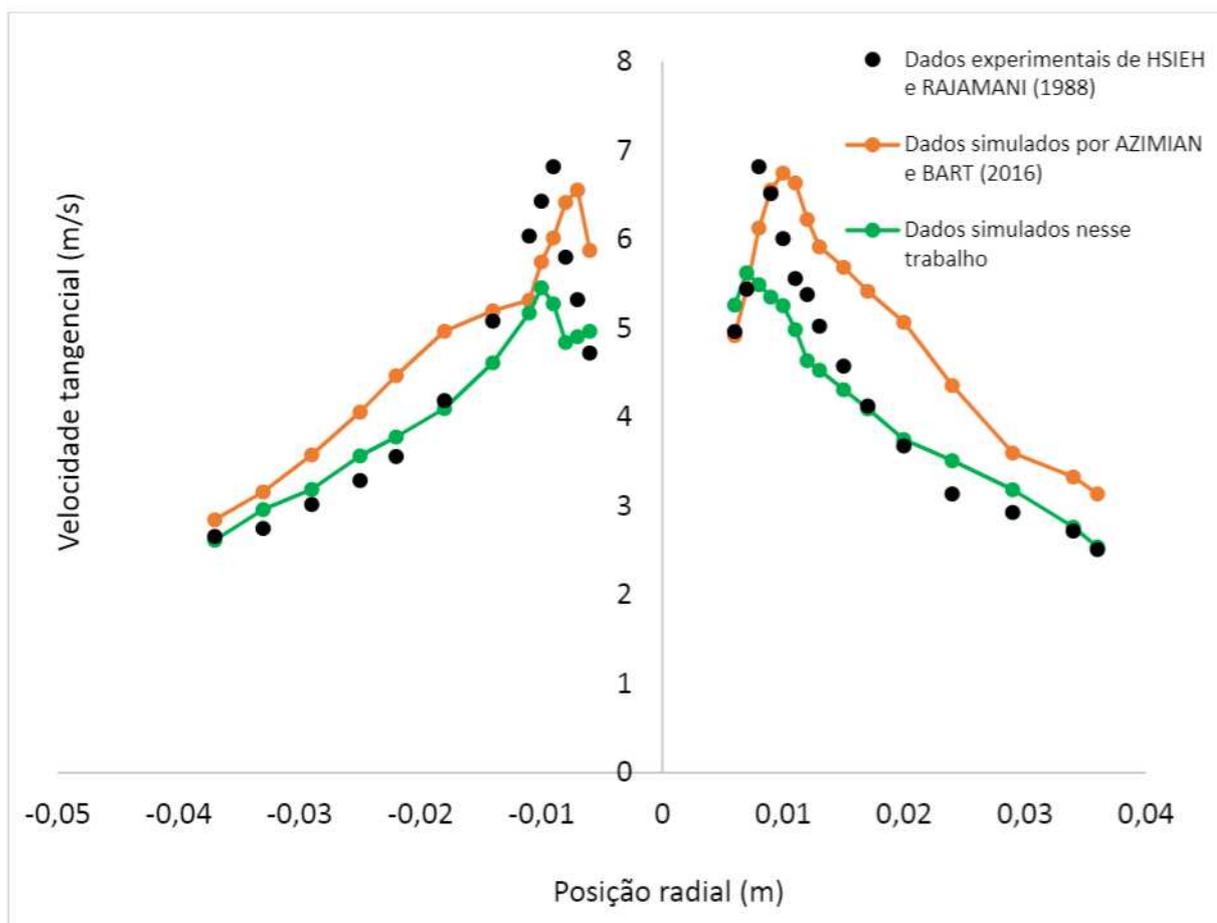
A primeira validação consistiu então na comparação dos dados simulados com os dados experimentais de HSIEH e RAJAMANI (1988), apresentados pelos autores AZIMIAN e BART (2016). Esses dados dizem respeito a velocidade tangencial das partículas de areia computados na região do hidrociclone mostrada pela Figura 18.

Figura 18 – Linha de corte em arco-íris onde os dados de velocidade tangencial para a partícula de areia foram coletados.



Os dados computados das velocidades tangenciais foram comparados tanto com os dados experimentais de HSIEH e RAJAMANI (1988) quanto com os dados simulados dos autores AZIMIAN e BART (2016), mostrados na Figura 19.

Figura 19 – Comparação dos dados calculados com os dados da literatura.



De acordo com a Figura 19, os valores calculados por esse trabalho, aproximaram bem dos valores experimentais na região radial entre 0,036 m até aproximadamente 0,01 m, o qual não ocorreu com os valores calculados pelos autores AZIMIAN e BART (2016).

O erro entre os valores calculados pelo modelo de CFD proposto e os valores experimentais, não ultrapassaram os 10%, que segundo a literatura seria o valor máximo de erro aceitável para simulações de hidrociclones (GHODRAT *et al.*, 2013).

Na região de alta turbulência, entre 0,00 e 0,01 m ao longo da posição radial, o modelo proposto neste trabalho não foi tão preciso quanto da literatura comparada, porém o perfil de velocidade tangencial como um todo, manteve-se próximo ao experimental.

Esse desvio no valor calculado dentro da região de redemoinho, ou tornado, do hidrociclone, é devido à grande complexidade de computar as tensões viscosas da suspensão e interação fase dispersa-fase contínua, que precisariam de uma região de

malha extremamente refinada aliado à um valor de passo de tempo muito pequeno para chegarem a um valor mais próximo do real.

Essas modificações no modelo de simulação consumiriam bastante tempo e poder computacional, o que tornaria um obstáculo considerável para a execução deste trabalho.

A segunda parte da validação do modelo consistiu na utilização do modelo empírico de PLITT (1976), descrito pela Equação 49. A Tabela 10 traz os valores de porcentagem de recuperação mássica de areia no *underflow* do hidrociclone em relação à sua alimentação em vários intervalos de tempo.

Tabela 10 – Recuperação mássica de areia ao longo do tempo.

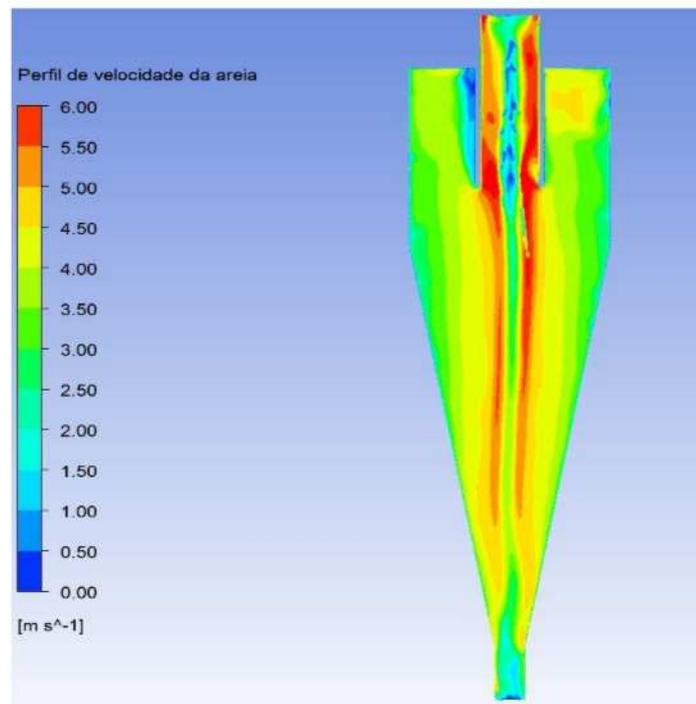
Tempo (s)	Recuperação (% m/m)
61,5	53,0
94,4	59,2
133,8	57,0
147,0	59,8
160,2	46,5
186,5	49,8
193,1	56,9
225,9	52,9
252,3	51,6
265,4	54,1
324,7	49,6
<b>Média</b>	<b>53,6</b>
<b>Real</b>	<b>50</b>
<b>Erro (%)</b>	<b>7,2</b>

Através da Tabela 10, percebe-se que o diâmetro de corte calculados pela Equação 49 levaram à uma recuperação de 53,6 % em massa de areia. Como na teoria fala que o diâmetro de corte é o tamanho de partícula que se distribui em 50 % para ambas as descargas do hidrociclone, temos então um erro de apenas 7,2 % na predição do diâmetro de corte através da simulação de validação do modelo.

Isso mostra que o modelo multifásico proposto por esse trabalho conseguiu descrever o modelo empírico proposto por PLITT (1976) dentro do erro permitido pela literatura (GHODRAT *et al.*, 2013).

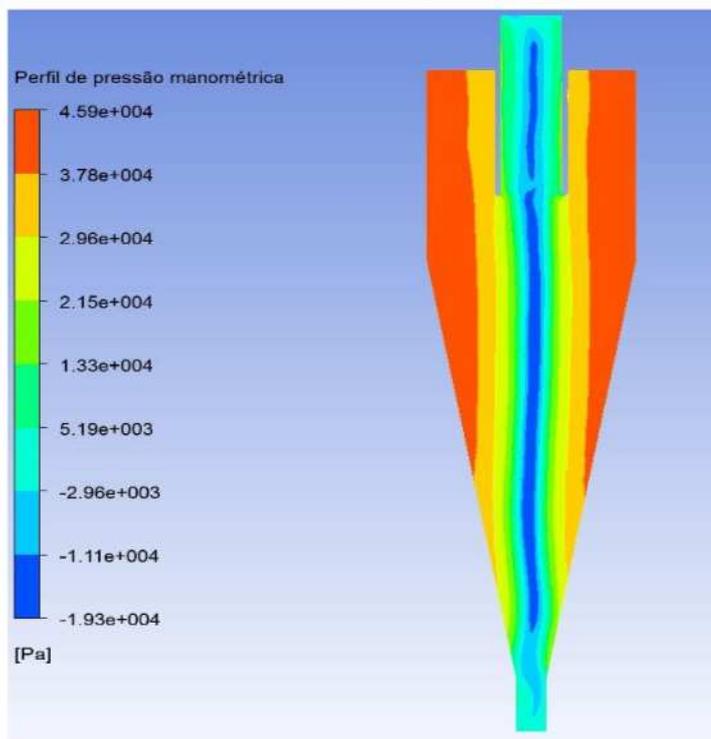
É importante ressaltar que os resultados coletados na simulação de validação do modelo, foram retiradas no momento em que o regime fluidodinâmico do hidrociclone atingiu um estado bastante próximo ao estacionário, como pode ser observado nas Figuras 20, 21 e 22.

Figura 20 – Magnitude da velocidade da fase dispersa (areia).



De acordo com a Figura 20, observa-se a formação de uma zona de máxima magnitude da velocidade da areia, próximo ao tornado, a qual diminui em uma taxa de aproximadamente 0,5 m/s para cada 0,5 mm de raio do hidrociclone, até atingir a magnitude de aproximadamente 1 m/s próximo à parede. O que faz sentido de acordo com o campo da força centrífuga distribuído no interior do separador.

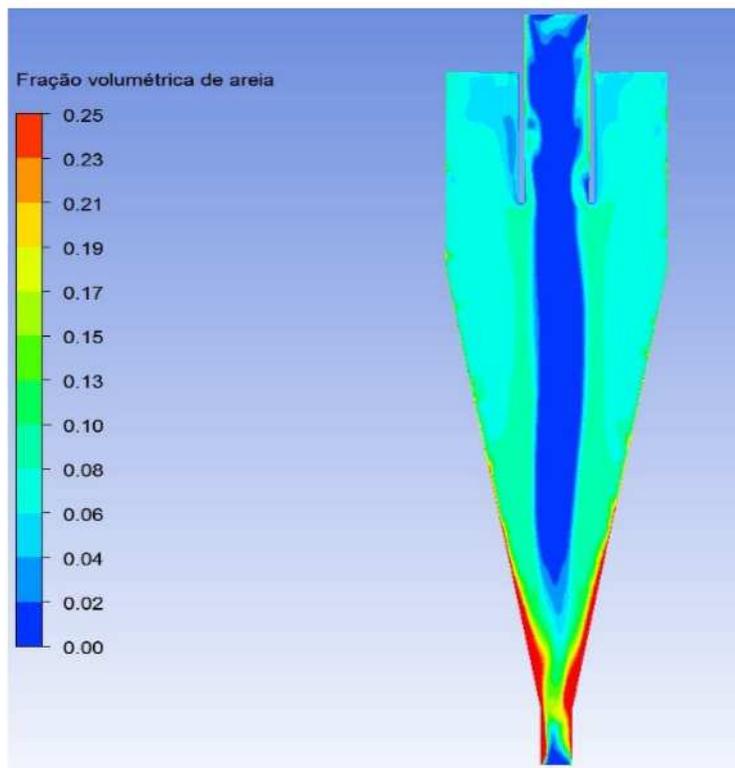
Figura 21 – Distribuição da pressão manométrica total.



A distribuição da pressão total no interior do separador de validação, pode ser observada através da Figura 21. Nela mostra um gradiente decrescente da pressão sentido parede para o centro do hidrociclone, com a presença de 4 zonas de transição da magnitude da pressão, na qual parte de seu máximo de 46 kPa e termina em -19 kPa, de onde se localiza a região de vácuo responsável pela força motriz de transporte da suspensão para a descarga do *overflow*.

Através desse mapa da pressão no interior do hidrociclone de validação calculado pela simulação, é notável a congruência com a física real desse tipo de separador.

Figura 22 – Distribuição da fração volumétrica da fase dispersa (areia).



Através da Figura 22, pode-se reparar na concentração das partículas de areia ao final da região cônica e início da descarga do *underflow*. Esse resultado se mostra de acordo com a física de separação da fase dispersa, nesse caso a areia, que possui uma densidade 2,3 vezes superior a densidade da água, nesse sentido se esperaria uma maior concentração dessas partículas na região inferior do separador centrífugo.

## 5.2 – Malhas computacionais dos hidrociclones separadores.

As malhas computacionais dos 8 hidrociclones da Tabela 7 e do hidrociclone de validação (AZIMIAN e BART, 2016), foram geradas pelo programa SALOME versão 8.3.0 juntamente com a plataforma cfMesh do OpenFOAM versão 17.12, de modo que todas foram do tipo hexaédricas não estruturadas. Cada malha criada traz sua respectiva característica estrutural de acordo com a Tabela 11, das quais mostram a confiabilidade de cada malha quanto sua qualidade no quesito ortogonalidade e traz também o valor médio do  $y^+$  das malhas.

A qualidade ortogonal de uma malha representa o quão uma célula está posicionada em relação a sua célula adjacente. Valores de qualidade ortogonal próximos de 0, representam um mal posicionamento, já valores próximos de 1, representam um

bom posicionamento. Isso reflete diretamente na capacidade de computar os gradientes das variáveis fluidodinâmicas na malha computacional.

A distorção ortogonal representa o quão a célula está distorcida da sua forma geométrica ideal, o que compromete também na computação das variáveis fluidodinâmicas, podendo comprometer os resultados. Valores de distorção próximos de 1, representam qualidade piores de células.

Tabela 11 – Informações sobre as malhas de cada hidrociclone.

Hidrociclone	Número de células	Porcentagem de células com a qualidade ortogonal abaixo de 0.5	Máximo de distorção ortogonal
H1	1.888.221	0.17%	0.848
H2	5.559.114	0.40%	0.855
H3	4.517.650	0.08%	0.899
H4	4.001.086	0.60%	0.831
H5	3.371.884	0.13%	0.877
H6	3.276.380	0.74%	0.841
H7	2.608.604	0.15%	0.845
H8	7.052.895	0.41%	0.808
Validação	3.505.475	0.98%	0.917
Y + médio	35,00		

O Fluent traz apenas os valores de distorção ortogonal máximos, sendo que a malha em geral apresenta valores variáveis deste parâmetro, ou seja, o valor médio está abaixo do valor mostrado na Tabela 11.

As malhas em geral apresentam uma qualidade razoavelmente boa pela baixa quantidade de células com qualidade ortogonal até 0.5, ou seja, grande parte das células de cada malha possuem uma qualidade ortogonal favorável a uma boa computação dos resultados das simulações.

É notável também que a qualidade das malhas dos 8 hidrociclones separadores ficaram superiores à malha de validação.

### 5.3 – Análise estatística da performance de cada hidrociclone na separação dos hidratos

A quantidade de hidrato recuperada por cada hidrociclone pode ser observado através da Tabela 12. Nesta tabela é mostrado sua concentração mássica na descarga do

*underflow* e *overflow*, além da porcentagem da massa de hidrato recuperada, em cada descarga, em relação aos 10% em massa de hidrato alimentado no hidrociclone.

Tabela 12 – Dados sobre a separação da suspensão de hidrato para cada hidrociclone.

Hidrociclone	Concentração de hidrato no <i>underflow</i> (% m/m)	Recuperação no <i>underflow</i>	Concentração de hidrato no <i>overflow</i> (% m/m)	Recuperação no <i>overflow</i>
H1	13.57%	30.59%	10.05%	69.41%
H2	14.14%	1.39%	10.95%	98.60%
H3	11.38%	80.97%	10.00%	19.03%
H4	34.37%	28.92%	8.70%	71.08%
H5	12.12%	38.13%	10.27%	61.87%
H6	00.00%	00.00%	9.09%	100%
H7	11.07%	83.87%	10.93%	16.13%
H8	12.92%	31.11%	10.27%	68.89%

Os dados da Tabela 12 foram calculados com base nos relatórios de vazão mássica (kg/s) das correntes de entrada e saída dos hidrociclones reportados pelo simulador Fluent 17.2.

Em uma análise geral da Tabela 12, pode-se observar que os hidrociclones não concentraram efetivamente a suspensão de hidrato, exceto o hidrociclone H4, em que conseguiu cumprir esse objetivo, aumentando a concentração de hidratos de 10% em massa (alimentação) para 34,37% (*underflow*).

A maior quantidade de massa de hidratos foi recuperada na descarga do *overflow* para a maioria dos hidrociclones, de acordo com a Tabela 12, porém a maior concentração do sólido foi presenciada na descarga *underflow*.

Como a diferença de densidade entre a água e o hidrato é baixa, aproximadamente 100 kg/m<sup>3</sup>, a força de arrasto da água (fase contínua) sobre o hidrato (fase dispersa) exerce maior influência sobre o escoamento em relação a força centrífuga, a qual influencia sobre a separação entre as fases, segundo DUECK *et. al.* (2000).

Portanto, isso explica a maior quantidade de hidrato sendo direcionado à descarga que contém o maior fluxo volumétrico de água.

Para se ter uma análise mais concisa dos resultados sobre a concentração da suspensão de hidrato no *underflow*, objetivo da ação centrífuga do hidrociclone para esse trabalho, esses resultados foram analisados no programa Statística versão 7.0, o qual gerou os dados de resposta presentes na Tabela 13.

Tabela 13 – Estimativa do efeito das variáveis de design no valor de concentração de hidratos na descarga do *underflow* para o planejamento fatorial fracionário  $2^{4+1}$ .

Fator	Efeito	Desvio padrão	t(3)	p	Limite de confiança a -95%	Limite de confiança a +95%
<b>Média</b>	<b>13,69</b>	<b>3,61</b>	<b>3,79</b>	<b>0,03</b>	<b>2,19</b>	<b>25,19</b>
(1) $D_o$	3,32	7,22	0,45	0,67	-19,67	26,32
(2) $D_u$	7,47	7,22	1,03	0,37	-15,52	30,47
(3) $L_{vf}$	-9,33	7,22	-1,29	0,28	-32,33	13,66
(4) L	-2,11	7,22	-0,29	0,78	-25,11	20,88

A Tabela 13 traz os dados da primeira linha em vermelho, isso indica que são dados estatisticamente significantes, já os demais não possuem significância estatística, uma vez que seus valores de p foram maiores que o limite de significância de 0.05, ou seja, sendo necessário considerar a hipótese nula (valores iguais estatisticamente).

O valor da média e dos efeitos individuais de cada fator foram calculados de acordo com as Equações 50 e 51 respectivamente.

$$eff_{m\u00e9dio} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} \quad (50)$$

$$eff_i = \frac{\sum_{i=1}^{n/2} y_{i(+)} - \sum_{i=1}^{n/2} y_{i(-)}}{n/2} \quad (51)$$

Em que  $y_{i(+)}$  representa os efeitos relacionados ao maior valor da variável de design;  $y_{i(-)}$  representa os efeitos relacionados com o menor valor da variável de design e  $n$  é o número de simulações realizadas com os hidrociclones, sendo 8 no total.

Isso quer dizer que a modificação de cada variável de design individualmente não influenciou significativamente a alteração da concentração da suspensão de hidrato.

Essa resposta estatística parece ser coerente com os resultados das concentrações mássicas de hidrato no *underflow*, pois, entre si, não se houve muita alteração quantitativa, exceto o H4 e o H6, dos quais distanciaram bastante da média.

Em relação ao H6, igualmente ao H2, houve um processo de rota preferencial por parte do escoamento em seus interiores. A diferença entre os diâmetros do *overflow* e do *underflow* foram suficientes para direcionar praticamente todo o fluxo da suspensão para a descarga superior.

O H2, por apresentar um maior comprimento e, conseqüentemente um tempo de residência superior ao H6, permitiu que a suspensão água/hidrato se acumulasse por mais tempo em seu volume, permitindo assim uma influência maior por parte do campo gravitacional, o qual direcionou os 1,39% em massa de hidrato para o *underflow*.

Por outro lado, o domínio geométrico do H6 permitiu que a suspensão alimentada se direcionasse preferencialmente para o *overflow*, sem sequer descarregar parte de sua massa no *underflow*.

Dessa maneira os hidrociclones H2 e H6 parecem não ser adequados para o espessamento da suspensão de hidrato, se levar em conta suas aplicações em processos de separação experimentais.

Utilizando a estatística do teste Qui-Quadrado (QQ), descrita no livro de FERNANDES (1999), é possível descobrir aproximadamente qual o valor mínimo, da concentração de hidratos na descarga dos hidrociclones, necessário para se ter uma significância estatística.

A Equação 52 traz o cálculo do fator QQ, designado por  $\chi^2$ , que descreve o quão distante a resposta observada está em relação à resposta esperada.

$$\chi^2 = \sum_{k=1}^n \frac{(O_k - E_k)^2}{E_k} \quad (52)$$

Em que  $O_k$  é o valor observado e  $E_k$  é o valor esperado.

Os valores de  $\chi^2$  seguem uma distribuição normal tabelada na qual é utilizada para consulta e comparação com os resultados calculados pela Equação 52. Os resultados de  $\chi^2$  tabelados são distribuídos em função do número de graus de liberdade da análise e do percentual de confiança determinado para tal análise estatística, que geralmente compreendem o valor de 95% de confiança, ou 5% de chance de erro.

Os hidrociclones foram divididos em dois grupos para a análise, sendo o grupo composto por: H1, H2, H3, H5, H7 e H8 e o segundo grupo composto por: H4 e H6. Essa divisão foi necessária pois os valores para a concentração de hidrato no *underflow* para os hidrociclones H4 e H6 foram muito diferentes dos demais.

Para o primeiro grupo, o número de graus de liberdade é igual à 5 (número de simulações do grupo – 1); considerando 5% de chances de erro (95% de confiança), o valor de  $\chi^2$  se encontra com o valor de 11,07, consultando a tabela do Apêndice A do livro de FERNANDES (1999).

Substituindo o valor de  $\chi^2 = 11,07$  na Equação 52 e resolvendo para  $E_k$ , com a condição em que o valor esperado para a concentração de hidrato na descarga deve ser superior à 10%, ou seja,  $E_k > 10$ , fica:

$$\frac{(13,57 - E_k)^2}{E_k} + \frac{(14,14 - E_k)^2}{E_k} + \frac{(11,38 - E_k)^2}{E_k} + \frac{(12,12 - E_k)^2}{E_k} + \frac{(11,07 - E_k)^2}{E_k} + \frac{(12,92 - E_k)^2}{E_k} - 11,07 = 0$$

$$E_k = 18,224\%$$

Dessa maneira, para que os hidrociclones do primeiro grupo pudessem gerar um resultado com 95% de confiança estatística para o valor da concentração de descarga da suspensão de hidrato, os mesmos deveriam espessar a suspensão para um valor no mínimo igual a 18,224% em massa de hidrato.

Portanto, confirma que o primeiro grupo de hidrociclones não cumpriram com o objetivo de concentrar a suspensão de hidrato a um valor significativo.

Para o segundo grupo de hidrociclones, o número de graus de liberdade é igual à 1 (número de simulações do grupo – 1). Considerando 5% de chances de erro (95% de confiança), o valor de  $\chi^2$  se encontra com o valor de 3,84.

Se calculado o valor de  $\chi^2$  para os hidrociclones H4 e H6, obtêm-se através da Equação 52:

$$\chi^2 = \frac{(34,37 - 10)^2}{10} + \frac{(00,00 - 10)^2}{10} = 69,39$$

O valor de 69,39 é maior do que 3,84, ou seja, a hipótese de que os valores de concentração da suspensão de hidratos no *underflow* são diferentes estatisticamente do valor de concentração da suspensão na alimentação dos hidrociclones, é válida, além de que essa validade está dentro de um nível de confiança ainda superior à 95%.

Através das análises estatísticas dessa seção, pode-se inferir que o hidrociclone H4 conseguiu espessar com uma boa eficiência e confiança estatística, a suspensão água/hidrato.

O hidrociclone H6 apresentou um resultado estatisticamente significativo da concentração da suspensão de hidrato diferente dos 10% em massa de hidratos na suspensão de alimentação. Porém, o valor foi 0%, demonstrando que o H6 não consegue espessar a suspensão água/hidrato, pois há uma possível situação de não-escoamento na descarga *underflow* deste equipamento.

Os demais hidrociclones, conseguiram concentrar a suspensão água/hidrato para valores acima de 10%, porém não foram valores com significância estatística. Dessa forma, os hidrociclones H1, H2, H3, H5, H7 e H8 não apresentaram uma conformação geométrica suficiente para um espessamento eficiente da suspensão estudada.

As variáveis de design  $D_o$ ,  $D_u$ ,  $L_{vf}$  e  $L$ , analisadas separadamente e sendo manipuladas em dois níveis distintos de medidas cada uma, não levaram à melhoria de eficiência na concentração da suspensão contendo 10% em massa de hidratos.

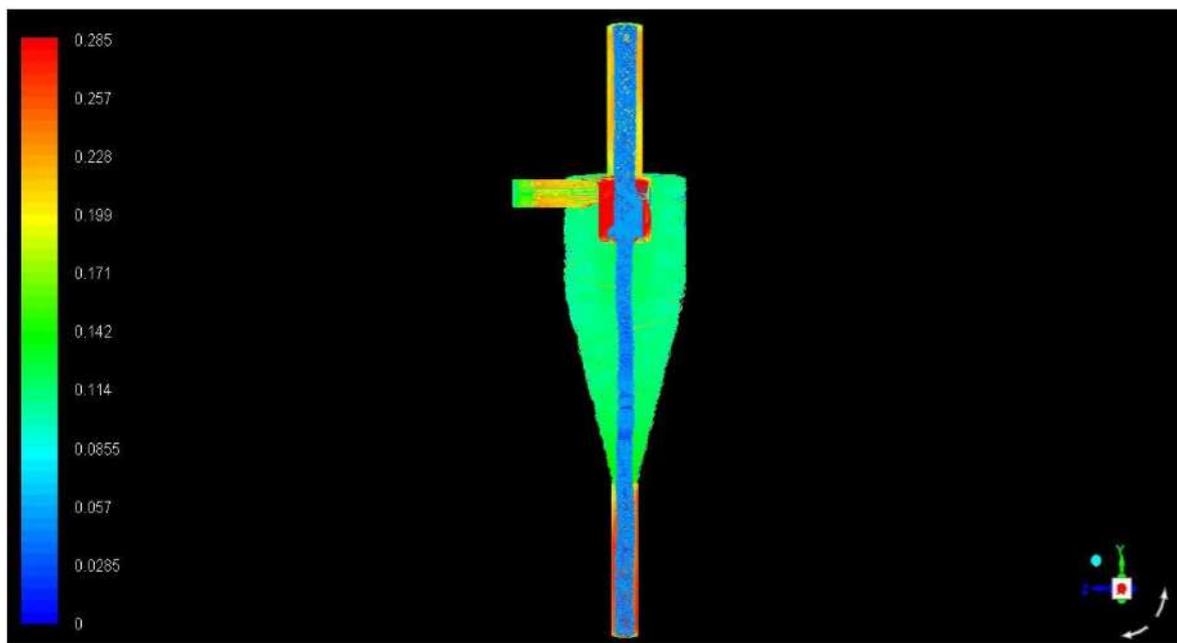
A melhoria da eficiência de espessamento por parte do hidrociclone, foi observada através da interação entre as medidas selecionadas para o H4 em específico.

#### 5.4 – Análise fluidodinâmica de cada hidrociclone

Essa seção traz o campo de escoamento da suspensão água/hidrato ao longo do domínio geométrico de cada hidrociclone. Discussões sobre o mapa de concentrações de hidrato são abordadas de forma a analisar a influência da geometria do equipamento sobre esta variável, assim como as distribuições de velocidades da fase hidrato (magnitude da velocidade) e pressão total.

As imagens mostrando as linhas de fluxo que escoam no interior dos hidrociclones, assim como as discussões sobre cada uma, podem ser observadas nas imagens em sequência.

Figura 23 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidrato ao longo do domínio do hidrociclone H1.



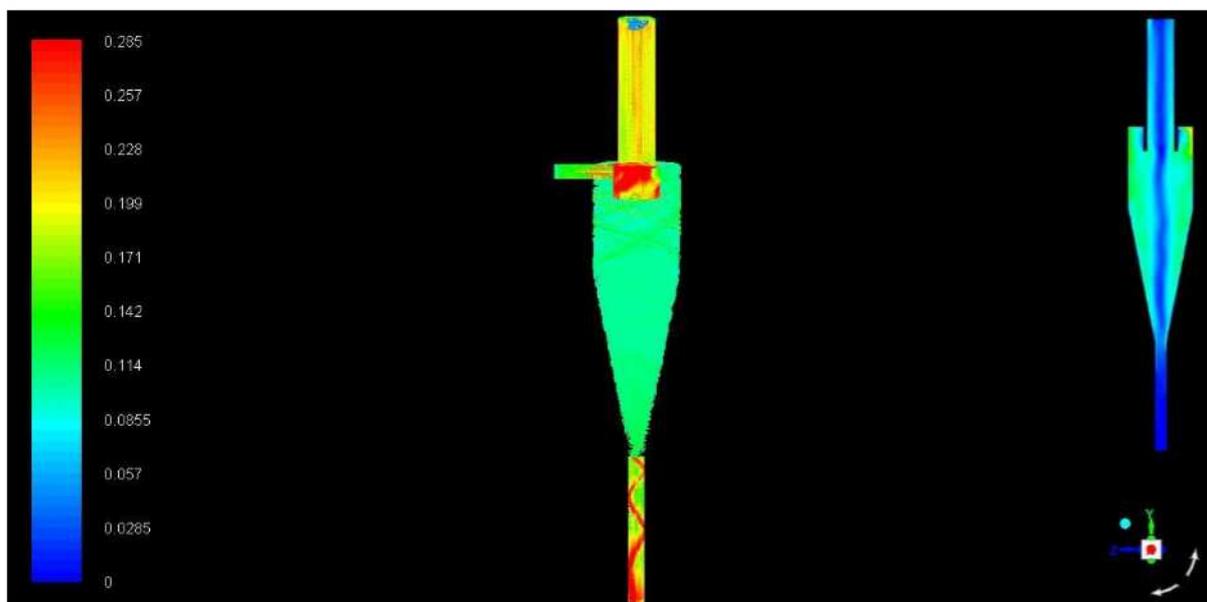
Observando a Figura 23, é possível observar a maior concentração da suspensão de hidrato nas paredes do tubo do *underflow*, cerca de 30% em massa de hidratos (28,5% em volume). Porém, pela Tabela 12, a concentração mássica da suspensão de hidratos na descarga do *underflow* é de apenas 13,57%.

Isso sugere uma retenção de massa de hidratos na parede, possivelmente causada pela presença do tornado formado na linha central do hidrociclone, o qual gera um campo centrífugo muito intenso e cria um vetor de força contra a parede.

Na saída *overflow*, ocorreu o mesmo fenômeno observado na saída *underflow*, porém a concentração de hidrato retido nas paredes dessa saída superior, foi de aproximadamente 23% em massa (21,3% em volume).

Há ainda uma retenção de partículas de hidrato que contornam as paredes do *vortex finder*, impedindo o fenômeno de *by pass* desse material pelo *overflow* (atalho percorrido pela suspensão alimentada, por onde ela flui diretamente para o *overflow*). Assim, forçou a suspensão a percorrer a trajetória padrão de escoamento dentro do hidrociclone, a qual se deposita em maior concentração na descarga do *underflow*.

Figura 24 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidrato ao longo do domínio do hidrociclone H2.



Em anexo a Figura 24, foi colocado o perfil da magnitude da velocidade do hidrato. Isso foi feito para mostrar que a distribuição de concentrações de hidrato não seguiu o seu padrão das velocidades ao longo do escoamento em forma de tornado criado no núcleo do hidrociclone. Isso mostra que houve uma homogeneidade na distribuição de hidrato no domínio do hidrociclone.

Aliando isso a análise da Tabela 12, é notável que o hidrociclone H2 não conseguiu concentrar a suspensão água/hidrato. O campo centrífugo criado em seu interior, através das suas proporções geométricas não permitiram essa concentração.

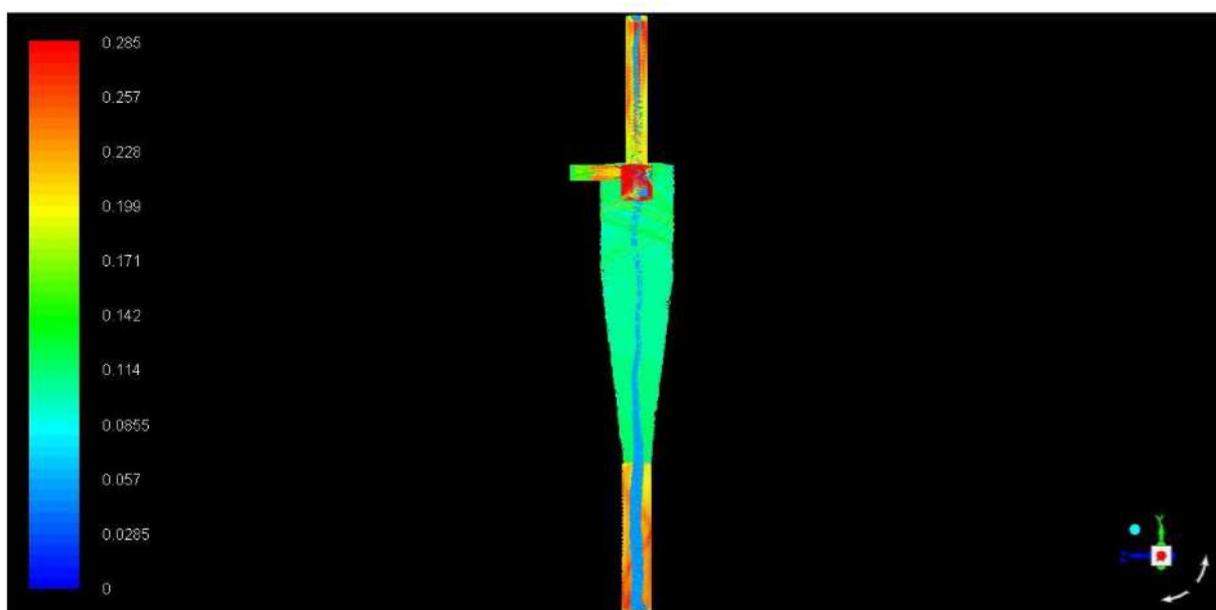
A razão de  $D_o/D_u$  igual a 2,41 aliada ao comprimento  $L = 91,73$  mm, não se mostraram ser eficientes na performance do equipamento para completar seu objetivo.

Nas paredes do *underflow*, foi observado uma retenção de aproximadamente 30% em massa de hidratos (28,5% em volume), semelhante a retenção observada em H1, porém a concentração de hidratos nesta descarga não ultrapassou os 14,14% m/m.

Houve a retenção de parte da massa de hidratos no *vortex finder*, porém o fenômeno de *by pass* ocorreu. E uma das observações para essa ocorrência, foi que a suspensão não foi separada e concentrada pelo hidrociclone.

Embora ocorrendo o fenômeno do *by pass*, essa homogeneidade ocorrida no H2 parece ter relação com a razão  $D_o/D_u$  e o valor de  $L$ .

Figura 25 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidrato ao longo do domínio do hidrociclone H3.



Analisando o H3, Figura 25, e suas proporções geométricas descritas pela Tabela 7, nota-se uma razão  $D_o/D_u$  menor que 1 (igual a 0,74), não comum no design dos hidrociclones pelo motivo de desfavorecer seu funcionamento padrão, concentrar a fração mais densa no *underflow* e a fração menos densa no *overflow* em sincronia com a força gravitacional.

Porém, foi testado esse design para a concentração da suspensão em estudo, por esta apresentar características físicas que fazem com que a força de arrasto da água tenha maior influência sobre seu escoamento e com isso um possível melhoramento na recuperação e concentração da suspensão de hidrato na descarga do *underflow*.

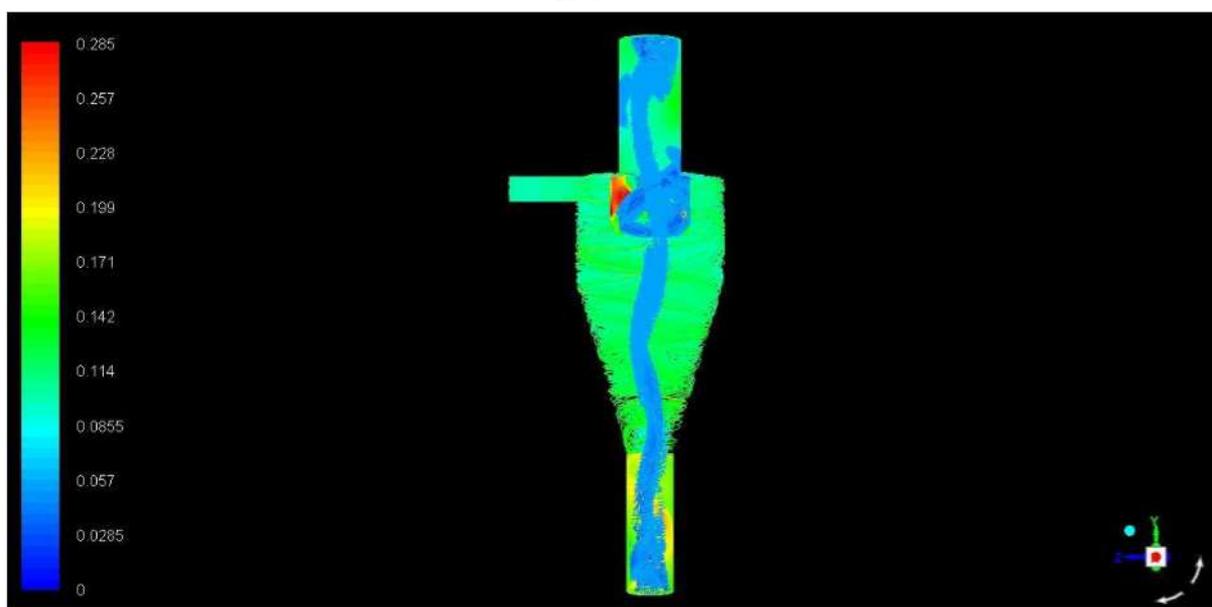
Entretanto os resultados mostraram que a maior massa de hidratos recuperada na *underflow*, não sofreu um aumento de concentração significativo em relação à alimentação.

Houve uma simetria de retenção de hidrato na parede do *underflow* e do *overflow*, mostrando que a performance de separação por parte deste hidrociclone não obteve sucesso.

Semelhante ao H2, o *vortex finder* parece não ter impedido o fenômeno do *by pass*, como foi observado na simetria discutida anteriormente.

A espessura do tornado ao centro do hidrociclone diminuiu no sentido base para o topo do equipamento, o que era de se esperar pelas proporções geométricas de ambas suas descargas.

Figura 26 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidrato ao longo do domínio do hidrociclone H4.



Através do hidrociclone H4, nota-se que não houve uma retenção das partículas de hidrato ao longo da parede da descarga *overflow* e uma pequena retenção (em termos de área superficial) do hidrato na parede do *underflow*.

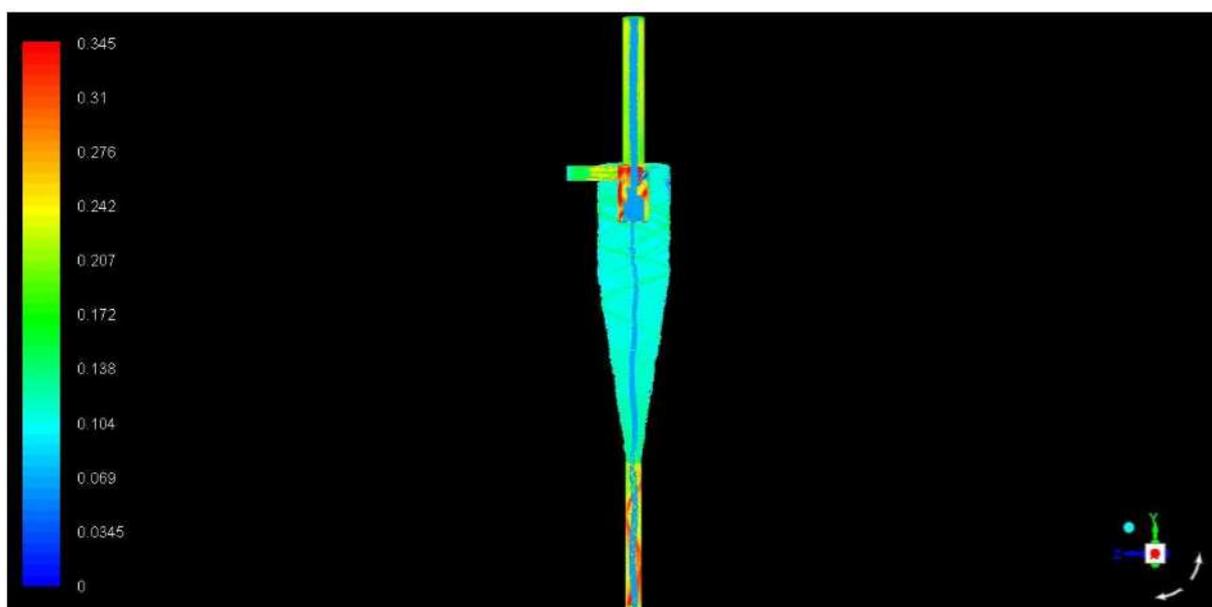
Praticamente toda massa de hidrato que seria retida pelas paredes do *underflow*, foi concentrada na descarga do *underflow*, o que mostrou concordância em relação aos dados apresentados pela Tabela 12.

O perfil de escoamento do hidrato no tornado formado neste hidrociclone apresentou um comportamento diferente dos demais, em que houve algumas regiões do

*vortex finder* e na parede do *overflow*, pelas quais apresentaram um gradiente turbulento de concentração de hidrato.

Isso possivelmente foi causado pela maior abertura, tanto do *underflow* quanto do *overflow* para a atmosfera, em conjunto com seu comprimento de 50,96 mm, que vieram a causar um campo centrífugo com maior flutuação em relação ao padrão dos demais hidrociclones; mas que, segundo os autores DYAKOWSKI e WILLIAMS (1993), é comum ocorrer em hidrociclones de pequenas escalas (presença de comprimentos entre 1 a 10 mm).

Figura 27 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidrato ao longo do domínio do hidrociclone H5.



O hidrociclone H5, apresentou um traço em espiral de retenção de aproximadamente 36,2% em massa (34% em volume) de hidrato na parede da descarga do *underflow*, semelhante ao hidrociclone H2.

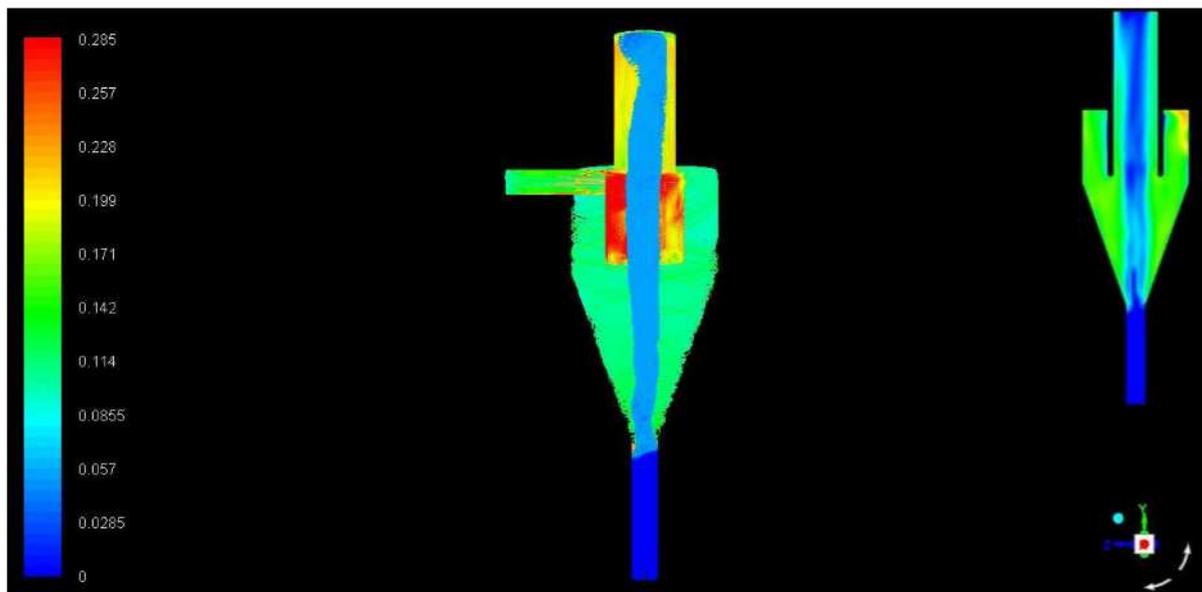
Porém, analisando a concentração de saída deste hidrociclone através da Tabela 12, o mesmo não conseguiu espessar com significância, a suspensão água/hidrato em relação a alimentação.

O *vortex finder* conseguiu evitar em parte o fenômeno do *by pass*, pois houve uma certa concentração de hidrato direcionada para o *underflow*.

O tornado formado no centro do hidrociclone apresentou uma espessura mais fina em relação aos demais hidrociclones. Isso era esperado, pois as dimensões de

ambas as descargas do equipamento são as mais finas e o seu comprimento é o maior dentro das medidas utilizadas nas geometrias dos demais hidrociclones. Portanto, essa conformação geométrica trouxe tal contração do *vortex* ou tornado.

Figura 28 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidrato ao longo do domínio do hidrociclone H6.



Semelhante ao hidrociclone H2, o H6 apresentou um estado ainda mais crítico de entupimento em relação a descarga de parte da massa de hidrato, saindo apenas água dessa saída. A Figura 28 mostra a ausência dessa massa no *underflow*.

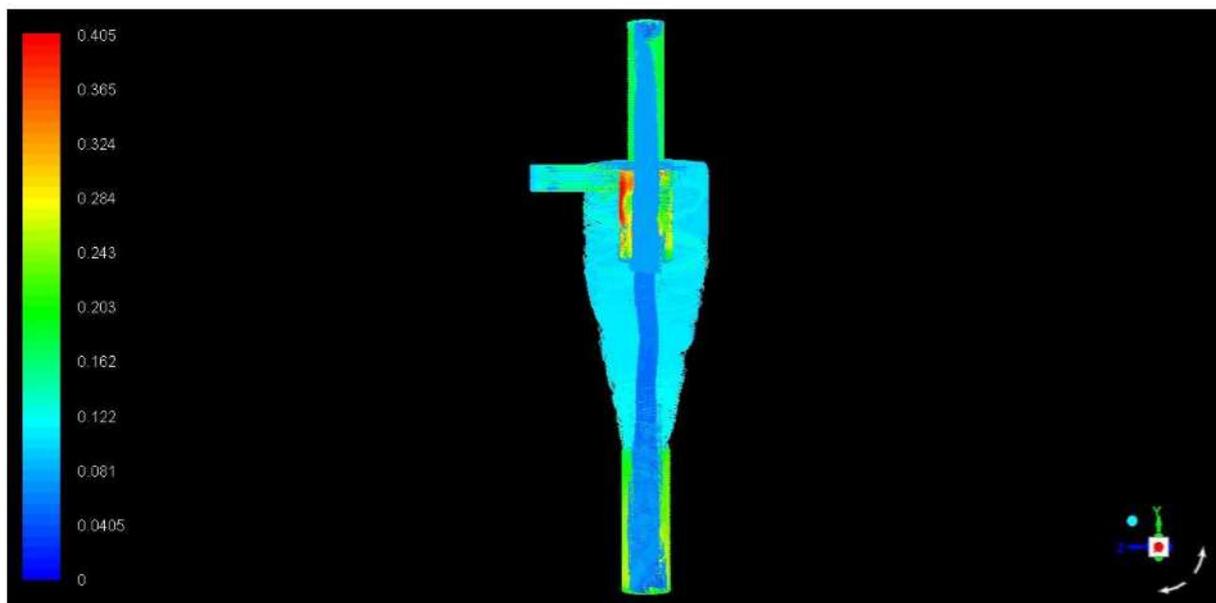
Ainda observando a Figura 28, é notável que o mapa de concentrações de hidrato seguiu seu perfil de velocidade, demonstrado no canto superior direito da Figura 28. Isso sugere que a diminuição do comprimento total do hidrociclone em relação ao H2, teve relação com a não homogeneização da suspensão.

Essa não homogeneização da suspensão também parece ter influência do aumento do comprimento do *vortex finder* em relação ao H2 também. Em que, o *by pass* parece ter sido evitado, porém é difícil de visualizar devido a ausência de hidrato na descarga do *underflow*.

Essa ausência de hidrato na descarga do *underflow*, pode ser explicada pela fração da força gravitacional na separação das fases da suspensão, causada pela pequena dimensão da ordem de grandeza do seu tempo de residência e pela grande razão geométrica,  $D_o/D_u = 2,4$ . Isso causou um direcionamento quase que instantâneo da suspensão alimentada em direção ao *overflow*, logo após formar o tornado. Por isso

também fica difícil de visualizar a influência do comprimento do *vortex finder* em evitar o fenômeno do *by pass*.

Figura 29 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidrato ao longo do domínio do hidrociclone H7.

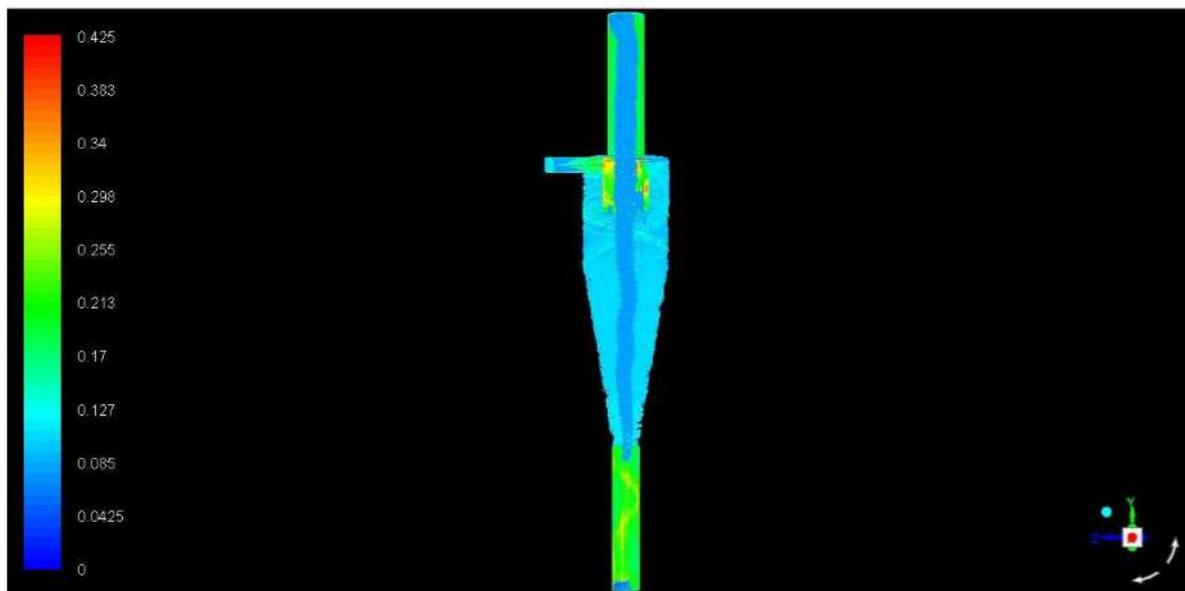


A mesma semelhança entre a distribuição das concentrações do hidrato nas paredes do *underflow* e *overflow* do H3, puderam ser observadas no hidrociclone H7, segundo a Figura 29, ambos possuem a mesma razão  $D_o/D_u = 0,74$ .

A espessura do tornado formado no interior do H7 foi superior ao tornado formado no H3, isso se deve à diminuição do comprimento total de H7 ( $L$ ), no qual a compressão causada pelas correntes de fluido em volta do tornado se tornam menos influentes na presença de cones com maiores ângulos de abertura, que seria o caso do H7 em relação ao H3.

O aumento do comprimento do *vortex finder* não surtiu efeito sobre a melhoria do efeito de *by pass* de hidrato no *overflow*, o que pode ser observado através da simetria na distribuição de concentração de hidrato através das paredes de ambas as descargas do hidrociclone H7.

Figura 30 – Linhas de corrente para a fração volumétrica de hidrato ao longo do domínio do hidrociclone H8.



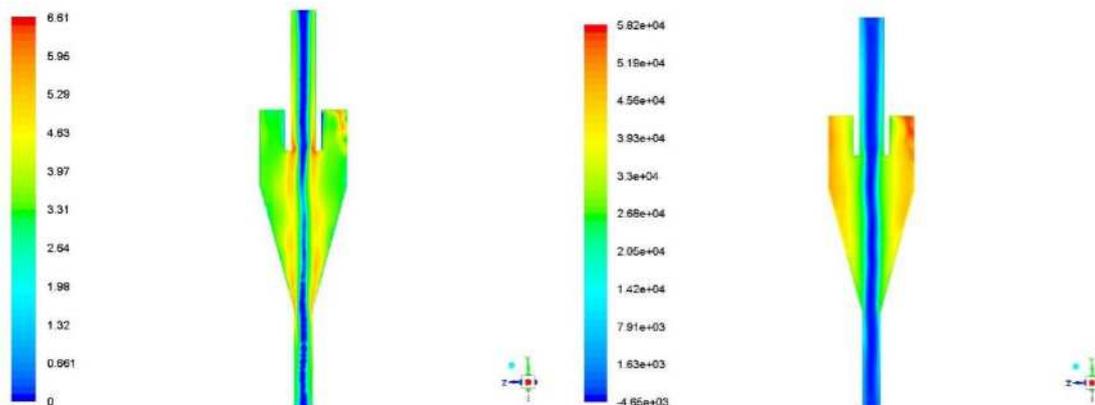
Segundo a Figura 30, o hidrociclone H8 apresentou uma pequena área em espiral na parede da descarga *underflow* que reteve aproximadamente 25% m/m de hidrato (23,2% v/v), porém a maioria da área desta parede, juntamente com a parede da descarga *overflow*, reteram aproximadamente 18,5% m/m (17,1% v/v) de hidratos.

A concentração de hidrato na descarga do *underflow* não sofreu diferença significativa em relação sua concentração na alimentação, de acordo com a Tabela 12, isso pode ser observado e confirmado pelas linhas de fluxo na Figura 30.

Em alguns pontos da parede do *vortex finder* podem ser observado uma retenção superior de hidrato, aproximadamente 45% m/m (42,5% v/v). Não pode ser confirmado se o efeito *by pass* pelo *overflow* foi evitado ou não pela ação do aumento de comprimento do *vortex finder* ( $L_{vf}$ ), pois a distribuição da concentração de hidrato se manteve homogênea ao longo do corpo do H8.

Em sequência a análise fluidodinâmica de cada hidrociclone, as imagens expondo os campos da magnitude da velocidade da fase hidrato, assim como a distribuição da pressão total dentro de cada hidrociclone são apresentadas. Dessa forma, o objetivo de visualizar a dinâmica ocorrida durante o escoamento da suspensão água/hidrato no interior dos equipamentos pode ser alcançado.

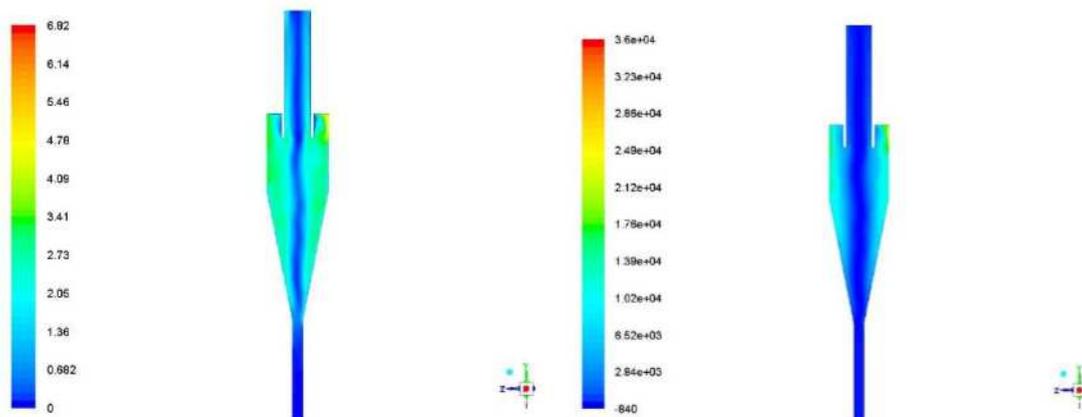
Figura 31 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H1 respectivamente.



Através da análise da distribuição de velocidade do hidrato em H1, pode-se observar a formação de uma camada em volta do vórtice central ou tornado, em que a velocidade das partículas do hidrato estão superiores em relação as demais áreas de escoamento no corpo do hidrociclone, chegando a ser superiores a velocidade de 5.35 m/s na alimentação do equipamento. Nas demais regiões, entre o núcleo e a parede do equipamento separador, a velocidade de escoamento do hidrato atingiu um valor médio de aproximadamente 3.3 m/s.

Houve a presença de um gradiente decrescente da pressão total com 3 zonas de transição, começando em aproximadamente 52 kPa, próximo à parede, passando para em torno de 39 kPa, decrescendo para 27 kPa aproximados até 8 kPa e finalizando em um vácuo de aproximadamente -4.6 kPa.

Figura 32 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato(m/s) e da pressão total (Pa) em H2 respectivamente.

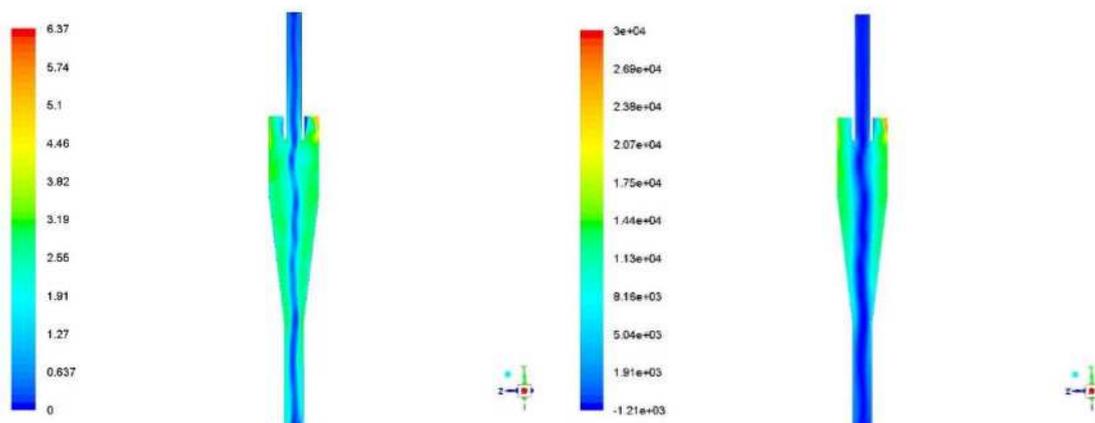


O perfil de velocidade apresentado na Figura 32, mostra que não houve formação de uma camada de maior velocidade próximo ao tornado no centro do hidrociclone, uma vez que a magnitude da velocidade do hidrato se manteve praticamente homogênea ao longo do corpo do separador, com um valor aproximado de 3 m/s.

O tornado se formou entre a descarga *overflow* e o bocal de início da descarga *underflow*, não percorrendo-o por inteiro. O que confirma a quase ausência de escoamento de hidrato no bocal do *underflow*, reportada na Tabela 12.

Houve o gradiente decrescente na distribuição da pressão total no interior do separador, porém com apenas uma zona de transição, de aproximadamente 15 kPa para 2 kPa, diferentemente do H1 que apresentou 3 zonas de transição.

Figura 33 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H3 respectivamente.

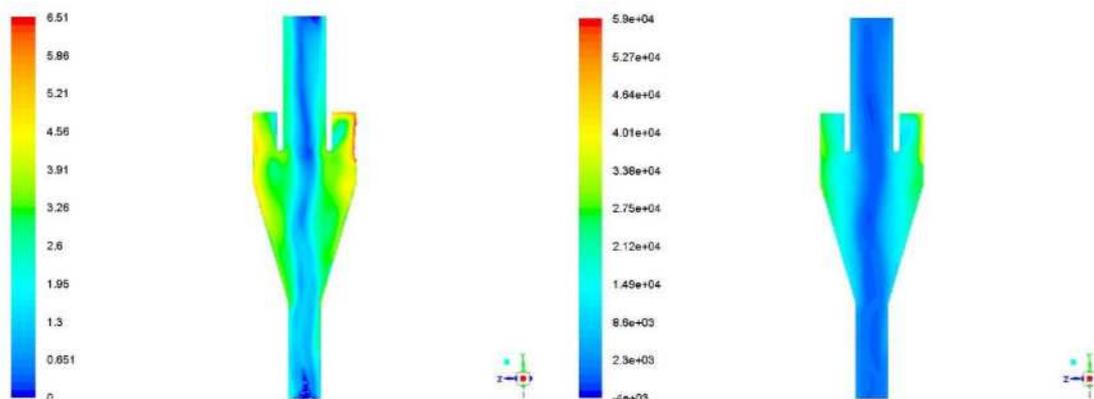


A Figura 33 mostra o maior direcionamento da suspensão para o *underflow* devido a maior abertura dessa descarga, em contrapartida da quase ausência de fluxo de hidrato na descarga do *overflow*.

Neste hidrociclone também não houve a formação de uma camada de maior velocidade do hidrato em volta do tornado central, mantendo a distribuição da magnitude da velocidade praticamente homogênea entre as paredes e o tornado a um valor de aproximadamente 3.1 m/s.

Semelhante ao H2, o separador H3 apresentou apenas uma zona de transição do gradiente decrescente da pressão total, percorrendo o valor de 14 kPa até o vácuo de -1,2 kPa no seu centro.

Figura 34 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H4 respectivamente.

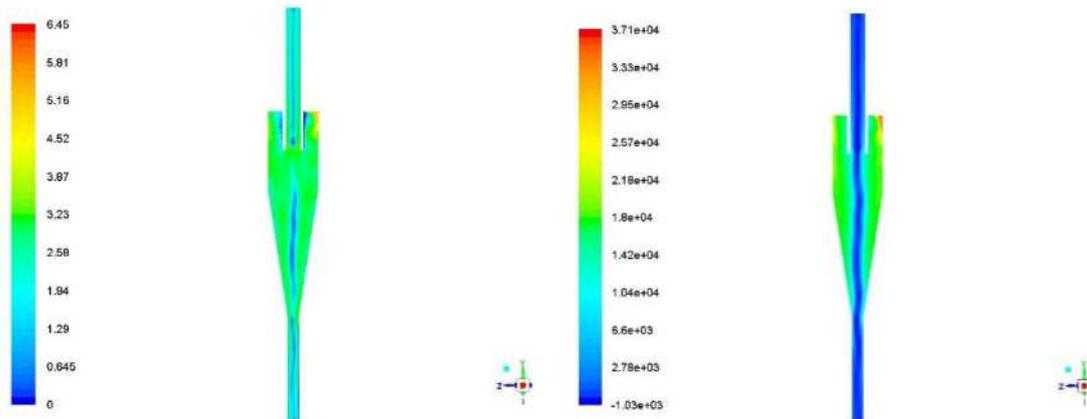


O hidrociclone H4 demonstrou a presença de hidrato na região central do tornado formado, segundo a Figura 34, onde a velocidade deste sólido chegou a 1.9 m/s aproximadamente. Não houve a formação de uma camada de maior magnitude da velocidade próximo ao tornado, mas sim uma distribuição da velocidade com certa homogeneidade entre a parede e o centro do separador, com um valor aproximado de 3.3 m/s. Nas paredes a magnitude da velocidade do hidrato chegou a um máximo de 5.8 m/s.

A distribuição da pressão total no interior de H4 apresentou apenas uma zona de transição, semelhante aos separadores H2 e H3, decrescendo de 27.5 kPa para 2.3 kPa aproximadamente, sentido parede-linha central. Houve vácuo apenas em alguns pontos da região central do vórtice, uma divergência peculiar em relação aos demais hidrociclones.

Essa divergência peculiar na distribuição da pressão total em H4, ocorreu provavelmente pela não formação do vácuo em todo seu núcleo, uma vez que, nessa região, observa-se uma pressão mínima de aproximadamente 2.3 kPa, deixando apenas algumas frações de áreas com um vácuo de -4 kPa aproximadamente.

Figura 35 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H5 respectivamente.

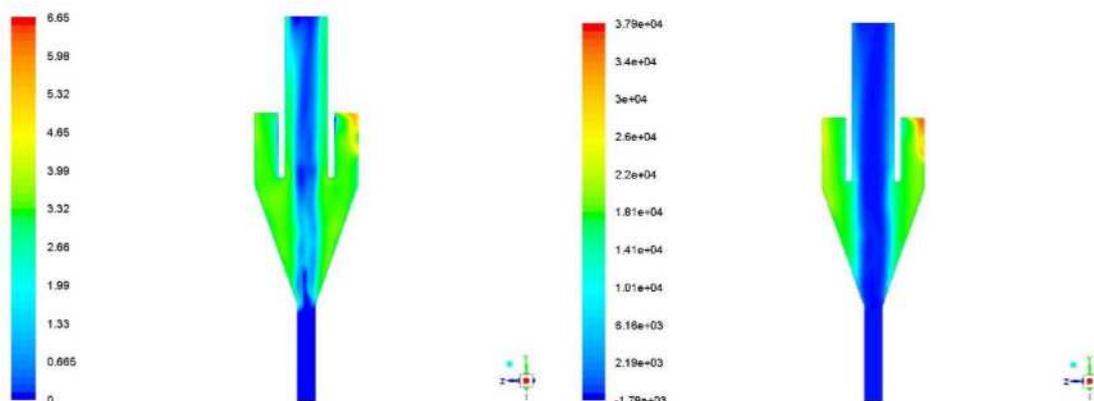


O separador H5 apresentou a formação do tornado em seu centro se estendendo até o final do bocal de descarga do *underflow*, semelhante ao H1, H3 e H4. Porém, a extensão de seu tornado ficou incompleta na região inferior da seção cônica e na região próxima ao início da parede do *vortex finder*. Provavelmente, isso foi causado pela influência da interação entre sua razão  $D_o/D_u$  e seu comprimento total (L), que causaram esse estiramento do tornado até seu ponto de ruptura.

Sua distribuição da magnitude da velocidade do hidrato foi praticamente homogênea ao longo do corpo cilíndrico e cônico de H5, apresentando um valor em torno de 3.2 m/s.

Segundo a Figura 35, a distribuição da pressão total no interior de H5 apresentou uma zona de transição decrescente muito pequena, quase imperceptível, partindo de aproximadamente 20 kPa, passando por aproximados 10.4 kPa e atingindo um vácuo por volta de -1.03 kPa.

Figura 36 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H6 respectivamente.



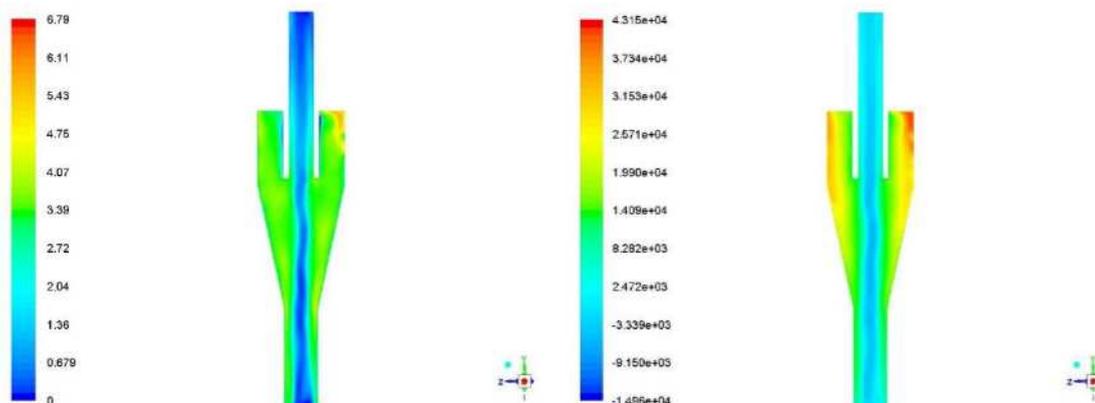
Semelhantemente ao H2, o separador H6 apresentou uma zona de ausência de escoamento de hidrato na descarga do *underflow*. Isso é notável através de ambos os gráficos de distribuição da magnitude da velocidade e da pressão total, vistos na Figura 36.

As partículas de hidrato mantiveram uma magnitude de velocidade homogênea desde a parede do separador até a intersecção com o tornado central, com um valor em torno de 3.3 m/s.

Houve a presença de uma certa quantidade de partículas de hidrato no interior do tornado, semelhante ao observado em H4, porém em menor quantidade, de acordo com o gráfico da magnitude da velocidade.

A distribuição da pressão total em H6 apresentou uma pequena, quase imperceptível, zona de transição decrescente, indo de um valor por volta dos 18 kPa, até atingir um vácuo de -1.78 kPa aproximadamente.

Figura 37 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H7 respectivamente.



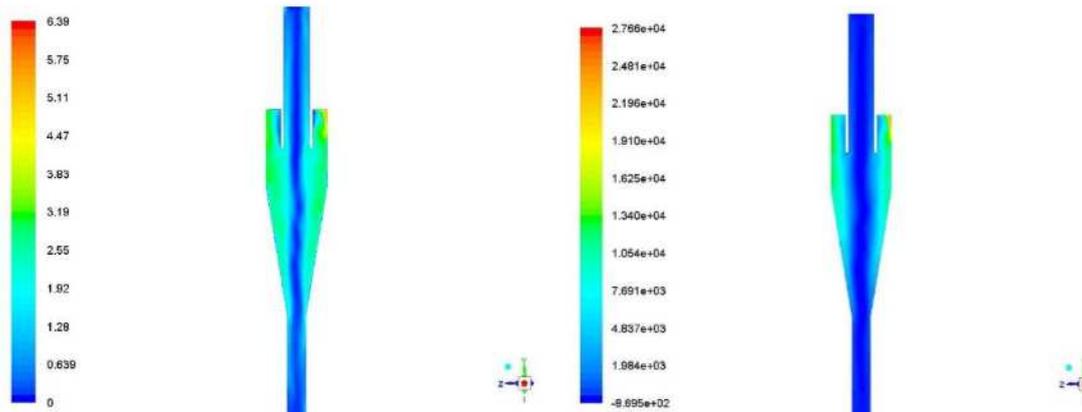
Através da Figura 37, observa-se também a ausência de uma região de maior magnitude da velocidade do hidrato nas proximidades do tornado formado na linha central de H7, observado em H1.

Ao longo de toda área de escoamento da suspensão entre a parede e o centro do hidrociclone, houve a presença de uma distribuição homogênea da magnitude da velocidade do hidrato em torno de 3.4 m/s.

Semelhantemente ao H3, a região de descarga do *overflow* apresentou pouco movimento da fase hidrato, pela presença de pouca massa desse sólido nessa região.

A distribuição da pressão total apresentou 3 zonas de transição, semelhantemente ao H1. Uma passando de aproximadamente 37 kPa para em torno de 25 kPa, decrescendo para 14 kPa aproximados até 2.5 kPa e finalizando em um vácuo de aproximadamente -9 kPa, um valor mais negativo que o vácuo de H1.

Figura 38 – Distribuição da magnitude da velocidade do hidrato (m/s) e da pressão total (Pa) em H8 respectivamente.



De acordo com a Figura 38, o gráfico das velocidades do hidrato mostra que a sua distribuição ocorreu com uma magnitude homogênea na área de escoamento entre as paredes e a linha central do hidrociclone. Esta distribuição ainda ficou com a magnitude um pouco abaixo dos demais hidrociclones, em torno de 2.5 m/s. O que é esperado, devido a sua capacidade volumétrica ser a maior entre todos os hidrociclones.

A formação do tornado se estendeu sobre toda a trajetória entre as descargas *overflow* e *underflow*, a partir de uma zona de vácuo central da ordem de aproximadamente -0,8 kPa.

O escoamento no interior do separador H8 apresentou 2 zonas de transição decrescente do gradiente de pressão total, visto na Figura 38. Houve um máximo de 13 kPa nas paredes, em seguida transitando em torno de 7.7 kPa e finalizando no vácuo de aproximados -0,8 kPa.

## 6 - CONCLUSÕES

Reunindo todas as informações coletadas ao longo deste trabalho, foi possível obter algumas conclusões a respeito da utilização da ferramenta CFD para obter dados inéditos na literatura sobre a performance do hidrociclone em trabalhar como espessador de hidratos, ou seja, promover o aumento da concentração da suspensão água/hidrato efluente do reator NETmix®, além de verificar a influência dos parâmetros geométricos nessa performance de espessamento. Essas conclusões são trazidas em sequência.

1. Os modelos matemáticos e fluidodinâmicos utilizados nesse trabalho, foram devidamente validados com dados experimentais na literatura dentro do limite de erro permissível;
2. Os resultados referentes à fluidodinâmica simulada neste trabalho, para todos os hidrociclones, estão de acordo com a física de escoamento padrão que ocorre no interior desse tipo de separador centrífugo;
3. Não foi observado diferença estatística significativa entre os valores de concentração de hidrato na descarga do *underflow* de cada um dos 8 hidrociclones, quando analisado a influência individual de cada variável de design dos mesmos;
4. Houve uma influência sistemática de interrelação entre todas as variáveis de design ( $D_o$ ,  $D_u$ ,  $L_{vf}$  e  $L$ ) no aumento de concentração de hidrato, observado em H4 em relação aos demais hidrociclones e em relação à alimentação, confirmados por significância estatística;
5. Os hidrociclones H2 e H6 apresentaram uma conformação geométrica desfavorável para a separação da suspensão alimentada em ambas as descargas *underflow* e *overflow*. Uma vez que apenas 1.39% da massa de hidrato alimentada no H2, foi recuperada e nenhuma massa do mesmo foi recuperada pelo H6;
6. O hidrociclone que conseguiu atingir o objetivo de espessar a suspensão aquosa de hidrato, foi o H4, aumentando sua concentração de 10% m/m para 34.37% m/m;

7. A razão  $D_o/D_u$ , em conjunto com o comprimento total do hidrociclone ( $L$ ) influenciaram na sua fluidodinâmica, de maneira que o aumento de ambos levaram ao aumento do vácuo no núcleo dos separadores, ou seja, pressões mais negativas, além de modificarem a forma do tornado formado no centro de cada separador;
8. Foi notado que a razão  $D_o/D_u = 11,43 \text{ mm}/4,76 \text{ mm} = 2,4$  não mostrou-se adequada para o projeto do hidrociclone espessador da suspensão aquosa de hidrato, pois em ambos os hidrociclones que apresentavam-na, ocorreu um direcionamento preferencial do hidrato para o *overflow*, como foi observado em H2 e H6;
9. A razão  $D_o/D_u = 6,35 \text{ mm}/8,57 \text{ mm} = 0,74$ , apenas aumentou a recuperação mássica de hidratos no *underflow*, porém a concentração da suspensão nessa saída manteve-se igual, estatisticamente, à concentração da suspensão alimentada;
10. A camada de maior magnitude da velocidade do hidrato apenas foi formada ao redor do tornado gerado no interior de H1, mostrando ser uma característica específica da conformação geométrica desse hidrociclone;
11. O comprimento do *vortex finder* ( $L_{vf}$ ) parece não ter mostrado influência no melhor espessamento de hidrato por parte dos hidrociclones. Em geral, a presença dessa parte estrutural auxiliou a evitar o fenômeno do *by pass* dos hidratos alimentados para a descarga do *overflow* diretamente;
12. Com exceção do H4, foi visto que em todos os hidrociclones, a suspensão de hidratos não alterou significativamente sua concentração entre a descarga e a alimentação. Isso ocorreu, pois a baixa diferença de densidade entre a água e o hidrato, faz com que a força de arrasto da água aplique maior influência sobre a fase hidrato em relação à força centrífuga (uma das responsáveis pela separação das fases);
13. Não se sabe com a determinada certeza se o modelo multifásico Euler-Euler seja o mais adequado para descrever a interação entre a fase água e a fase hidrato, por ainda não possuir outros estudos sobre a fluidodinâmica da suspensão água/hidrato;
14. O hidrociclone possui um certo potencial de espessar a suspensão aquosa do hidrato de gás, como pode ser observado através dos dados simulados de H4.

15. Esse potencial mostrou-se ser sensível à interrelação das variáveis de design escolhidas para sua construção;
16. O estudo fluidodinâmico apresentado nesse trabalho, apresenta uma evolução no campo da pesquisa científica que compreende a área responsável pelo desenvolvimento de novas tecnologias envolvendo os hidratos de gases.

## 7 – PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS

1. Testar mais relações geométricas, pois assim será possível avaliar mais amplamente suas influências na capacidade de espessamento dos hidrociclones e possivelmente encontrar uma relação geométrica ótima para realizar tal objetivo;
2. Ser observado e estudado experimentalmente com mais detalhes as características físico-químicas e reológicas da suspensão de hidrato, planejar quais outros modelos multifásicos a fluidodinâmica pode oferecer para descrever a física de escoamento da suspensão de hidratos de gases e estudar cada um deles;
3. Fazer um estudo comparativo entre os outros modelos multifásicos fluidodinâmicos e determinar qual melhor se aplica à suspensão aquosa de hidrato de gás;
4. Fazer a construção do hidrociclone separador e estudá-lo experimentalmente em paralelo ao estudo com a ferramenta CFD. Isso irá fazer com que a pesquisa sobre o processo de separação do hidrato de gás se direcione para um nível industrial, contribuindo assim para o desenvolvimento de novas tecnologias nessa área.

## 8 - REFERÊNCIAS

AKW EQUIPAMENTOS E PROCESSOS. Hidrociclones AKA-VORTEX e distribuidores radiais AKA-SPIDER. 2019. Disponível em: <<https://www.akwauv.com/Hidrociclones-AKA-VORTEX-e-distribuidores-radiais-AKA-SPIDER.htm>>. Acesso em: 13 abr. 2019.

AMARAL, M. Uso de hidrociclones na separação de partículas de baixa densidade no processo de perfuração com duplo gradiente. Rio de Janeiro: Curso de Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2008. 78 p. Dissertação (Mestrado)

ANSYS Inc. ANSYS Fluent 12.0: User's guide. EUA: ANSYS Inc., 2009. 2070 p.

ANSYS Inc. ANSYS Fluent 12.0: Theory guide. EUA: ANSYS Inc., 2009. 816 p.

AYA, I.; YAMANE, K.; NARIAI, H. Solubility of CO<sub>2</sub> and density of CO<sub>2</sub> hydrate at 30 MPa. *Energy*, v.22, n.2, p. 263-271, February 1997.

AZIMIAN, M.; BART, H. Numerical analysis of hydroabrasion in a hydrocyclone. *Petroleum Science*, v.13, n.4, p. 304-319, April 2016.

BAKKER, R. J.; THIÉRY, R. Application of clathrates to fluid inclusions studies. In IMA '94 SHORT COURSE ON FLUID INCLUSIONS IN MINERALS, 1994, Siena. *Proceedings...* v.1, p. 191-208, September 1994.

BLAZEK, J. *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*. 3. ed. Oxford: Butterworth Heinemann, 2015. 447 p.

BOZZO, A. T.; CHEN, H. S.; KASS, J. R.; BARDUHN, A. J. The properties of the hydrates of chlorine and carbon dioxide. In 4<sup>TH</sup> INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON FRESH WATER FROM SEA, 1973, Heidelberg. *Proceedings...* Desalination, 1975. v.16, p. 303-320.

BRADLEY, D. *The Hydrocyclone*. Oxford: Pergamon Press, 1965. 348 p.

BRITO, A. J.; ALMEIDA, A. T.; MOTA, C. M. M. A multicriteria model for risk sorting of natural gas pipelines based on ELECTRE TRI integrating Utility Theory. *European Journal of Operational Research*, v.200, n.1, p. 812-821, January 2009.

CHAN, W. N. Avaliação da Mitigação das Emissões de CO<sub>2</sub> para uma Refinaria de Petróleo no Brasil. Campinas: Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Estadual de Campinas, 2015. 243 p. Tese (Doutorado)

CHIALVO, A. A.; HOUSSA, M.; CUMMINGS, P. T. Molecular dynamics study of the structure and thermophysical properties of model sI clathrate hydrates. *J. Phys. Chem.*, v.106, n.2, p. 442-451, February 2002.

COKLJAT, D.; SLACK, M.; VASQUEZ, S. A.; BAKKER, A.; MONTANTE, G. Reynolds-Stress Model for Eulerian multiphase. *Progress in Computational Fluid Dynamics*, v.6, n.1-3, p. 168-178, April 2006.

CROWE, C. T.; SCHWARZKOPF, J. D.; SOMMERFELD, M.; TSUJI, Y. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. 2. ed. Boca Raton: Crc Press - Taylor & Francis Group, 2012. 487 p.

DALY, B. J.; HARLOW, F. H. Transport Equations in Turbulence. *The Physics of Fluids*, v.13, n.11, p. 2634-2649, November 1970.

DASHTI, H.; YEW, L. Z.; LOU, X. Recent advances in gas hydrate-based CO<sub>2</sub> capture. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v.23, n.3, p. 195-207 March 2015.

DELGADILLO, J. A.; RAJAMANI, R. K. A comparative study of three turbulence-closure models for the hydrocyclone problem. *International Journal of Mineral Processing*, v.77, n.4, p. 217-230, December 2005.

DELGADILLO, J. A.; RAJAMANI, R. K. Exploration of hydrocyclone designs using computational fluid dynamics. *International Journal of Mineral Processing*, v.84, n.1-4, p. 252-261, October 2007.

DONALDSON, C. P. A Computer Study of an Analytical Model of Boundary-Layer Transition. *Aiaa Journal*, v.7, n.2, p. 271-278, February 1969.

DUAN, Z.; MOLLER, N.; WEARE, J. H. An equation of state for the CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O system II: Mixtures from 50 to 1000°C and 0 to 1000 bar. *Geochimica Et Cosmochimica Acta*, v.56, n.7, p. 2619-2631, July 1992.

DUAN, Z.; SUN, R. An improved model calculating CO<sub>2</sub> solubility in pure water and aqueous NaCl solutions from 273 to 533 K and from 0 to 2000 bar. *Chemical Geology*, v.193, n.3-4, p. 257-271, February 2003.

DUC, N.H., CHAUVY, F., HERRI, J.M. CO<sub>2</sub> Capture by Hydrate Crystallization - A Potential Solution for Gas Emission of Steelmaking Industry. *Energy Convers. Manag.*, v.48, n.4, p. 1313-1322, April 2007.

DUECK, J. G. MATVIENKO, O. V. NEESSE, T. Modeling of hydrodynamics and separation in a hydrocyclone. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, v.34, n.5, p. 428-438, May 2000.

DYAKOWSKI, T.; WILLIAMS, R. A. Modelling turbulent flow within a small-diameter hydrocyclone. *Chemical Engineering Science*, v.48, n.6, p. 1143-1152, June 1993.

ENOKI, T. A. Caracterização por espalhamento de luz de dispersões aquosas de agregados lipídicos aniônicos. São Paulo: Curso de Física, Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 2010. 125 p. Dissertação (Mestrado)

FERDOWS, M.; OTA, M. Density of CO<sub>2</sub> hydrate by Monte Carlo simulation. *Journal of Mechanical Engineering Science*, v.220, n.5, p. 691-696, May 2006.

FERNANDES, E. M. G. P. *Estatística Aplicada*. Braga: Edite Manuela da G.P. Fernandes e A. Ismael F. Vaz, 1999, 299 p.

FILHO, P. R. C. S. Utilização da injeção de CO<sub>2</sub> como método de recuperação avançada em reservatórios do pré-sal. Rio de Janeiro: Curso de Engenharia de Petróleo, Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2016. 66 p. Dissertação (Graduação)

FONTE, C. M.; LEBLEBICI, M. E.; DIAS, M. M.; LOPES, J. C. B., 2012. The NETmix® Reactor: 3D CFD Modeling and pressure drop measurements, in: 14TH EUROPEAN CONFERENCE ON MIXING, 2012, Warszawa, 10-13 September 2012. p.107-112.

GABITTO, J. F.; TSOURIS, C. Physical Properties of Gas Hydrates: A Review. *Journal of Thermodynamics*, v.2010, n.11, p. 1-12, November 2009.

GEANKOPLIS, C. J. *Transport Processes and Unit Operations*. 3. ed. New Jersey: Prentice-hall International, 1993. 921 p.

GENCK, W. J. *Liquid-Solid Operations and Equipament*. In: GREEN, D. W.; PERRY, R. H. *Perry's Chemical Engineers': Handbook*. 8. ed. New York: Mcgraw-hill, 2008. Cap. 18. p. 1-151.

GHODRAT, M.; KUANG, S. B.; YU, A. B.; VINCE, A. BARNETT, G. D.; BARNETT, P. J. Computational Study of the Multiphase Flow and Performance of Hydrocyclones: Effects of Cyclone Size and Spigot Diameter. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v.52, n.10, p. 16019-16031, October 2013.

GIBSON, M. M.; LAUNDER, B. E. Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer. *J. Fluid Mech*, v.86, n.6, p. 491-511, June 1978.

GOMIDE, R. *Operações Unitárias: Separações Mecânicas*. Volume 3. São Paulo: Reynaldo Gomide, 1980. 199 p.

GRACE, J. R.; WAIREGI, T.; NGUYEN, T. H. Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, v. 54, n.7, p. 167-173, July 1976.

GREEN, D. W.; PERRY, R. H. *Perry's Chemical Engineers': Handbook*. 8. ed. New York: Mcgraw-hill Inc., 2008. 2735 p.

GUDMUNDSSON, J. S. Method for production of gas hydrates for transportation and storage. EUA nº US 5536893A. Jul. 16, 1996.

HANDA, Y. P. Compositions, enthalpies of dissociation, and heat capacities in the range 85 to 270 K for clathrate hydrate of methane, ethane, and propane, and enthalpy of dissociation of isobutane hydrate, as determined by a heat-flow calorimeter. *J. Chem. Thermodynamics*, v.18, n.1, p.915-921, January 1986.

HSIEH, K. T.; K. RAJAMANI. Phenomenological model of the hydrocyclone: Model development and verification for single-phase flow. *International Journal of Mineral Processing*, v.22, n.4, p. 223-237, April 1988.

HUANG, S. Numerical Simulation of Oil-water Hydrocyclone Using Reynolds-Stress Model for Eulerian Multiphase Flows. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.83, n.10, p. 829-834, October 2005.

KELSALL, D. F. A further study of the hydraulic cyclone. *Chemical Engineering Science*, v.2, n. 6, p. 254-272, December 1953.

KOH, C. A.; SLOAN, E. D. Natural Gas Hydrates: Recent Advances and Challenges in Energy and Environmental Applications. *Aiche Journal*, v.53, n.7, p. 1636-1643, July 2007.

KOTHANDARAMAN, J.; GOEPPERT, A.; CZAUN, M.; OLAH, G. A.; PRAKASH, G. K. S. CO<sub>2</sub> Capture by Amines in Aqueous Media and its Subsequent Conversion to Formate With Reusable Ruthenium and Iron Catalyst. *Royal Society of Chemistry*, v.1, n. 1, p. 1-8, January 2016.

LARANJEIRA, P. E.; MARTINS, A. A.; LOPES, J. C. B.; DIAS, M. M. NETmix®, A New Type of Static Mixer: Modeling, Simulation, Macromixing, and Micromixing Characterization. *AIChE Journal*, v.55, n. 9, p.2226-2243, September 2009.

LAUNDER, B. E. Second-moment closure and its use in modeling turbulent industrial flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v.9, n.8 p. 963-985, August 1989. [2]

LAUNDER, B. E. Second-moment closure: present... and future?. *International Journal Heat and Fluid Flow*, v. 10, n.4, p. 282-300, December 1989. [1]

LAUNDER, B. E.; REECE, G. J.; RODI, W. Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure. *J. Fluid Mech.*, v.68, n.3, p. 537-566, April 1975.

LIEN, F. S.; LESCHZINER, M. A. Assessment of turbulence-transport models including nonlinear RNG eddy-viscosity formulation and second-moment closure for flow over a backward-facing step. *Computers Fluids*, v.23, n.8, p. 983-1004, November 1994.

LINGA, P.; KUMAR, R.; ENGLEZOS, P. Gas hydrate formation from hydrogen/carbon dioxide and nitrogen/carbon dioxide gas mixtures. *Chemical Engineering Science*, v.62, n.16, p. 4268-4276, August 2007.

LUMLEY, J. L. Computational Modeling of Turbulent Flows. *Advances in Applied Mechanics*, v.18, p. 123-176. 1979.

MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2 ed. Rio de Janeiro: LTC Editora S.A., 2004. 472 p.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOTT, P. *Unit Operations of Chemical Engineering*. 5. ed. New York: McGraw-Hill Inc., 1993. 1130 p.

MEI, R.; KLAUSNER, J. F. Shear lift force on spherical bubbles. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v.15, n.1, p. 62-65, February 1994.

MERCADO, R. Z. R.; SÁNCHEZ, C. B. Optimization Problems in Natural Gas Transportation Systems: A State-of-the-Art Review. *Applied Energy*, v.147, n.6, p. 536-555, June 2015.

MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA. *Boletim Mensal de Acompanhamento da Indústria de Gás Natural*. 131 ed. Brasília: Ministério de Minas e Energia, Secretaria de Petróleo, Gás Natural e Combustíveis Renováveis, set. 2018. 41 p.

MOUSAVIAN, S. M.; NAJAFI, A. F. Influence of geometry on separation efficiency in a hydrocyclone. *Archive of Applied Mechanics*, v.79, n.11, p. 1033-1050, November 2009.

MOUSAVIAN, S. M.; NAJAFI, A. F. Numerical Simulations of gas-liquid-solid flows in a hydrocyclone separator. In: *JOINT ASME/JSME FLUIDS ENGINEERING CONFERENCE*, 5., 2007, San Diego. *Proceedings of FEDSM2007*. San Diego: Asme, 2007. p. 1 - 10.

NAGESWARARAO, K. *et al.* Two empirical hydrocyclone models revisited. *Minerals Engineering*, v.17, n.5, p. 671-687, May 2004.

PARK, S., LEE, S., LEE, Y., LEE, Y., SEO, Y. Hydrate-based Pre-Combustion Capture of Carbon Dioxide in the Presence of a Thermodynamic Promoter and Porous Silica Gels. *Int. J. Greenh. Gas Control*, v.14, n.5, p. 193-199, May 2013.

PEPPER, R. E.; SAMUELS, R. J. Refractometry. *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*, v.14, n. 2, p.261-298, January 2013.

PLITT, L. R. A mathematical model of the hydrocyclone classifier. *CIM Bulletin*, v.69, n.12, p. 114-123, December 1976.

RAZIYEH, S.; ATAALLAH, S. G. CFD simulation of an industrial hydrocyclone with Eulerian–Eulerian approach: A case study. *International Journal of Mining Science and Technology*, v.24, n.5, p. 643-648, September 2014.

RENAULT-CRISPO, J. S.; COULOMBE, S.; SERVIO, P. Kinetics of carbon dioxide gas hydrates with tetrabutylammonium bromide and functionalized multi-walled carbon nanotubes. *Energy*, v.128, n.6, p. 414-420, June 2017.

RIETEMA, K. Performance and design of hydrocyclones III: Separating power of the hydrocyclone. *Chemical Engineering Science*, v.15, n.3-4, p. 310-319, September 1961.

ROCHELLE, G. T. Amine scrubbing for CO<sub>2</sub> capture. *Science*, v.325, n.9, p. 1652-1654, September 2009.

ROSA, A. J.; CARVALHO, R. S.; XAVIER, J. A. D. Engenharia de Reservatórios de Petróleo. Rio de Janeiro: Interciência, 2006. 808 p.

SAFFMAN, P. G. Corrigendum to: The lift on a small sphere in a slow shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 31, n.3, p. 624, February 1968.

SAFFMAN, P. G. The lift on a small sphere in a slow shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 22, n.2, p. 385-400, June 1965.

SALIM M. S. CHEAH, S. C. Wall  $y^+$  Strategy for Dealing with Wall-bounded Turbulent Flows. In: INTERNATIONAL MULTICONFERENCE OS ENGINEERS AND COMPUTER SCIENTISTS, II, 2009, Hong Kong. Proceedings... Hong Kong: IMECS, 2009. p. 1-6.

SCHLIEPER, G. Principles of gamma ray densitometry. *Metal Powder Report*, v.55, n.12, p. 20-23, December 2000.

SHELL OIL COMPANY, Estados Unidos. David Randolph Smith. Method for the sub-sea separation of hydrocarbon liquids from water and gases. EUA nº US 6245955 B1. Jun. 12, 2001.

SLACK, M. D.; PRASAD, R. O.; BAKKER, A.; BOYSAN, F. Advances in Cyclone Modelling Using Unstructured Grids. *Chemical Engineering Research and Design*, v.78, n.8, p. 1098-1104, November 2000.

SLOAN, E. D.; KOH, C. A. Clathrate Hydrates of Natural Gases. 3. ed. New York: Crc Press, 2007. 752 p.

SLOAN, E.; FLEYFEL, F. Hydrate dissociation enthalpy and guest size. *Fluid Phase Equilibria*, v.76, n.8, p.123-140, August 1992.

STERN, L. A.; CIRCONE, S.; KIRBY, S. H. Anomalous Preservation of Pure Methane Hydrate at 1 atm. *J. Phys. Chem*, v.105, n.9, p. 1756-1762, February 2001.

STERN, L. A.; KIRBY, S. H.; DURHAM, W. B. Peculiarities of Methane Clathrate Hydrate Formation and Solid-State Deformation, Including Possible Superheating of Water Ice. *American Association for The Advancement Of Science*, v.273, n.5283, p.1765-1968, September 1996.

STEWART, M.; ARNOLD, K. Gas-Liquid and Liquid-Liquid Separators. Burlington: Gulf Professional Publishing, 2008. 226 p.

SVAROVSKY, L. Solid-Liquid Separation. 4. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. 554 p.

SWAIN, S.; MOHANTY, S. A 3-dimensional Eulerian–Eulerian CFD simulation of a hydrocyclone. *Applied Mathematical Modelling*, v.37, n.5, p. 2921-2932, March 2013.

TAKAHIRO KIMURA; SHOJIRO IWASAKI; KATSUO ITOH. Gas hydrate production device and gas hydrate dehydrating device. EUA n° US 2005/0107648 A1. May 19 ,2005.

TELETZKE, G. F.; PATEL, P. D.; CHEN, A. L. Methodology for Miscible Gas Injection EOR Screening. In: SOCIETY OF PETROLEUM ENGINEERS INTERNATIONAL, 97650., 2005, Kuala Lumpur. Proceedings... Kuala Lumpur: SPE, 2005. p. 1 – 11.

THOMAS, D. G. Transport characteristics of suspension: VIII. A note on the viscosity of Newtonian suspensions of uniform spherical particles. *Journal of colloid science*. Oak Ridge, vol. 20, n.3, p. 267-277, March 1965.

TIAN, Z. F.; TU, J. Y.; YEOH, G. H. Numerical Simulation and Validation of Dilute Gas-Particle Flow Over a Backward-Facing Step. *Aerosol Science and Technology*, v.39, n.4, p. 319-332, February 2005.

TING, D. Basics of Engineering Turbulence. Londres: Academic Press, 2016. 234 p.

TU, J.; YEOH, G. H.; LIU, C. Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach. 2. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2013. 435 p.

VAKAMALLA, T. R.; MANGADODDY, N. Numerical simulation of industrial hydrocyclones performance: Role of turbulence modelling. *Separation and Purification Technology*, v.176, n.4, p.23-39, April 2017.

VAN WACHEM, B. G. M.; SCHOUTEN, J. C.; KRISHNA, R.; VAN DEN BLEEK, C. M. Validation of the Eulerian simulated dynamic behaviour of gas-solid fluidised beds. *Chemical Engineering Science*, v.54, n.13-14, p. 2141-2149, July 1999.

VELUSWAMY, H. P.; KUMAR, A.; KUMAR, R.; LINGA, P. An innovative approach to enhance methane hydrate formation kinetics with leucine for energy storage application. *Applied Energy*, v.188, n.2, p. 190-199, February 2017.

VIEIRA, L. G. M.; SILVÉRIO, B. C.; DAMASCENO, J. J. R.; BARROZO, M. A. S. Performance of hydrocyclones with different geometries. *The Canadian Journal Of Chemical Engineering*, v.89, n.4, p. 655-662, August 2011.

VYSNIAUSKAS, A.; BISHNOI, P. R. A kinetic study of methane hydrate formation. *Chemical Engineering Science*, v.38, n.7, p.1061-1072, July 1983.

WANG, B.; YU, A. B. Numerical study of the gas–liquid–solid flow in hydrocyclones with different configuration of vortex finder. *Chemical Engineering Journal*, v.135, n.1-2, p. 33-42, January 2008.

XIAOFANG, L.V. BOHUI, S. YING, W. JING, G. Study on Gas Hydrate Formation and Hydrate Slurry Flow in a Multiphase Transportation System. *Energy & Fuels*, v.27, n.12, p.7294-7302, November 2013.

YAKHOT, V.; ORSZAG, S. A. Renormalization group analysis of turbulence: I. Basic Theory. *Journal of Scientific Computing*, v.1, n.1, p. 3-51, March 1986.

YANG, D.; LE, L. A.; MARTINEZ, R. J.; CURRIER, R. P.; SPENCER, D. F.; DEPPE, G. Heat Transfer During CO<sub>2</sub> Hydrate Formation in a Continuous Flow Reactor. *Energy & Fuels*, v.22, n. 4, p.2649-2659, June 2008.