MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE HIDROCICLONES PARA A REMOÇÃO DE PARTÍCULAS DE ENXOFRE DA SOLUÇÃO DE FE(III)EDTA NO PROCESSO DE PURIFICAÇÃO DE BIOGÁS.

Matheus Lombardi de Mello Croscato (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Anderson Rafael Igarashi (Coorientador), Nehemias Curvelo Pereira (Orientador). E-mail: ncpereira@uem.br.

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia, Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Engenharias /Modelagem, Simulação, Síntese, Otimização e Controle de Processos.

Palavras-chave: biometano, separação de partículas, fluidodinâmica computacional.

RESUMO

O artigo visa avaliar o comportamento do escoamento e a eficiência de separação do enxofre elementar em um hidrociclone por meio de simulações numéricas a partir da fluidodinâmica computacional, validando os resultados com base na literatura. A metodologia empregada contou com o uso de modelos de turbulência em regime transiente, associado ao modelo de fase discreta para rastreamento de partículas. Os resultados indicaram que o modelo desenvolvido apresenta bom desempenho na representação do escoamento, porém, evidenciaram limitações no comportamento das partículas, indicando a necessidade da utilização de um modelo de escoamento multifásico (VOF) para uma descrição mais precisa do processo. Conclui-se que a abordagem numérica adotada é adequada para a análise da dinâmica do fluido, mas apresenta limitações no tocante à separação do enxofre elementar.

INTRODUÇÃO

O sulfeto de hidrogênio (H_2S), presente no biogás, é um composto corrosivo que pode causar danos a equipamentos e contribuir para a formação de chuva ácida (FRARE *et al.*, 2010). Sua remoção pode ser realizada por absorção química utilizando o Fe^{3+}/EDTA (ferro (III)-EDTA), processo que promove a formação de enxofre elementar sólido (SCHIAVON MAIA *et al.*, 2017) (Equação 1).

$$H_2S_{(aq)} + 2Fe^{3+}/EDTA \rightarrow S_{(s)} + 2H^+ + 2Fe^{2+}/EDTA \quad (1)$$

O enxofre sólido formado pode ser separado da solução pela ação das forças centrífugas em um hidrociclone, devido ao deslocamento das partículas em direção às paredes do equipamento (CREMASCO, 2018). Nesse contexto, a fluidodinâmica computacional (CFD) permite avaliar o escoamento e a separação de partículas, considerando variáveis como pressão e velocidade. Assim, este trabalho avaliou o escoamento e a eficiência de separação em um mini-hidrociclone por meio de

simulações em CFD, com uso dos modelos de turbulência acoplados ao modelo de fase discreta, comparando os resultados numéricos obtidos com dados da literatura.

MATERIAIS E MÉTODOS

CONSTRUÇÃO DO HIDROCICLONE

A partir dos valores dos parâmetros geométricos do mini-hidrociclone estudado por Almeida *et al.* (2021) (Figura 1), a geometria do equipamento foi construída no *Ansys SpaceClaim®* disponibilizado no pacote *Ansys Student 2025 R2®*. Iniciando a partir de um corte vertical, desenhou-se a metade direita da estrutura e, em seguida, aplicou-se a ferramenta de revolução de sólido para gerar o volume completo.

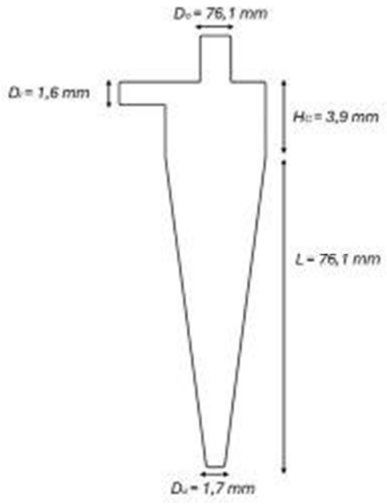


Figura 1 - Geometria do hidrociclone construído no *Ansys SpaceClaim®*.

A malha computacional foi construída no *Ansys Mechanical®* (Figura 2), utilizando o método *MultiZone* com predominância de elementos hexaédricos e aplicação de *inflation layer* junto às paredes, visando melhor representação do escoamento na região próxima à parede.

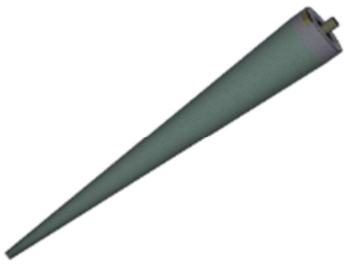


Figura 2 - Malha numérica construída no software *Ansys Mechanical®*.

MODELAGEM NUMÉRICA E CONDIÇÕES DE CONTORNO

As simulações foram realizadas em regime transiente, sendo avaliado o modelo de tensão de Reynolds (RSM). O rastreamento de partículas foi realizado pelo modelo de fase discreta (DPM). Como condições de contorno, foi estabelecida a vazão de entrada do hidrociclone, enquanto as saídas foram definidas conforme as condições de operação. As simulações foram realizadas com 1000 *time-steps* de 0,001 s, totalizando 1 s de simulação, utilizando um computador com processador Intel Core i5-13420H. As partículas de enxofre foram injetadas a partir do momento de estabilização do escoamento, em aproximadamente 0,5 s.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Um teste de independência de malha avaliou três malhas com 68.216, 181.855 e 352.479 elementos. As malhas 2 e 3 apresentaram resultados de perda de carga (ΔP) próximos aos valores experimentais de Almeida *et al.* (2021), enquanto a malha 1 apresentou valor inferior. Considerando a similaridade dos resultados e o menor custo computacional devido ao menor número de elementos, a malha 2 foi selecionada para as simulações posteriores.
Após a seleção da malha computacional, foram realizadas simulações em regime transiente para as vazões de alimentação de 1800, 2000, 2200 e 2400 $mL \cdot min^{-1}$, utilizando o modelo RSM. Após a estabilização do escoamento, foram avaliadas a perda de carga, a razão entre as vazões das correntes de saída superior (*overflow*) e inferior (*underflow*) (Tabela 1).

Tabela 1 - Resultados da simulação numérica para diferentes vazões.

Vazão ($mL \cdot min^{-1}$)	ΔP (bar)	Vazão alimentação ($kg \cdot s^{-1}$)	Vazão *overflow* ($kg \cdot s^{-1}$)	Vazão *underflow* ($kg \cdot s^{-1}$)
1800	2,449	0,0331	0,0205	0,0126
2000	3,166	0,0367	0,0229	0,0137
2200	3,924	0,0404	0,0255	0,0149
2400	4,816	0,0441	0,0279	0,016

Observou-se que o aumento da vazão de alimentação promoveu aumento da perda de carga e das vazões mássicas nas correntes de saída, comportamento semelhante ao observado na literatura e associado à maior velocidade de entrada, à intensificação do escoamento rotacional e da dissipação de energia, conforme Lv, Xiang e Wang (2023). Os campos de pressão apresentaram maiores valores na região de alimentação, com redução progressiva ao longo do corpo do hidrociclone em direção às saídas. Para a velocidade, observou-se a formação do escoamento helicoidal característico do equipamento, com aumento da intensidade do campo à medida que a vazão de alimentação foi elevada.

A comparação com os resultados experimentais de Almeida *et al.* (2021) apresentou boa concordância para a perda de carga, com os valores simulados apresentando comportamento compatível com os resultados experimentais e próximos de 3,5 bar na condição intermediária. Entretanto, a recuperação da solução catalítica apresentou valores simulados entre 61,93% e 63,27%, superiores ao valor experimental de 46,48 ± 1,25%. A eficiência de separação das partículas não foi utilizada como parâmetro de validação, devido aos valores excessivamente elevados obtidos nas simulações.

CONCLUSÕES

Dessa forma, o modelo adotado apresentou desempenho satisfatório na representação do comportamento hidrodinâmico e da perda de carga do mini-hidrociclone, mas limitações na previsão da separação sólido-líquido.

AGRADECIMENTOS

Este projeto foi financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), com apoio da Universidade Estadual de Maringá (UEM).

REFERÊNCIAS

ALMEIDA, F. N. C. *et al*. Avaliação de um mini-hidrociclone para separação de enxofre e recuperação da solução catalítica em um processo purificação de biogás. *In*: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 23., 2021, Gramado. **Anais** [...]. Campinas: Galoá, 2021.

CREMASCO, M. A. **Operações Unitárias Em Sistemas Particulados e Fluidomecânicos.** 3. ed. São Paulo: Blucher, 2018.

FRARE, L. M. *et al.* Hydrogen sulfide removal from biogas using Fe/EDTA solution: Gas/liquid contacting and sulfur formation. **Environmental Progress & Sustainable Energy**, v. 29, n. 1, p. 34–41, 8 abr. 2010.

LV, X.; XIANG, L.; WANG, T. Numerical and experimental study of inlet velocity effects on separation performance of hydrocyclones for purifying low-grade phosphate ore. **Results in Engineering**, v. 20, p. 101408, 2023.

SCHIAVON MAIA, D. C. *et al.* Removal of H 2 S and CO 2 from biogas in bench scale and the pilot scale using a regenerable Fe-EDTA solution. **Renewable Energy**, v. 109, p. 188–194, ago. 2017.