

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA LABORATÓRIO DE REFERÊNCIA EM DESSALINIZAÇÃO

OLÍVIA JÚLIA SILVA GOMES

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL E COMPUTACIONAL DA DINÂMICA DOS FLUIDOS DE UM BIOESTERILIZADOR PARA DESCONTAMINAÇÃO AMBIENTAL E DE PESSOAS

> CAMPINA GRANDE – PB 2021

OLÍVIA JÚLIA SILVA GOMES

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL E COMPUTACIONAL DA DINÂMICA DOS FLUIDOS DE UM BIOESTERILIZADOR PARA DESCONTAMINAÇÃO AMBIENTAL E DE PESSOAS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Kepler Borges França

CAMPINA GRANDE – PB 2021 Gomes, Olívia Júlia Silva. Avaliação experimental e computacional da dinâmica dos fluídos de um bioesterilizador para descontaminação ambiental e de pessoas / Olívia Júlia Silva Gomes. - Campina Grande, 2021. 62 f. : il. Color
Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2021. "Orientação: Prof. Dr. Kleper Borges França". Referências.
1. Transferência de Calor e Massa. 2. Esterilização a Vapor. 3. Covid-19. 4. Fluído Dinâmica Computacional. I. França, Kleper Borges. II. Título.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECÁRIA ITAPUANA SOARES DIAS CRB-15/93

FOLHA DE APROVAÇÃO

Jeres :

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL E COMPUTACIONAL DA DINÂMICA DOS FLUIDOS DE UM BIOESTERILIZADOR PARA DESCONTAMINAÇÃO AMBIENTAL E DE PESSOAS

A comissão examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação, elaborada por Olívia Júlia Silva Gomes, como requisito para obtenção do título de Mestre em Engenheira Química pela Universidade Federal de Campina Grande.

Aprovado em: 02 de Fevereiro de 2021.

Externo/Universidade Católica

Prof. Dr. Kepler Borges França - Orientador

Prof. Dr. Antonio Carlos Sales Vasconcelos - Examinador Externo/IFMA

C Riano

Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto – Examinador Interno/UFCG Assinado por : LICÍNIO MANUEL GANDO DE AZEVEDO FERREIRA Num. de Identificação: BI112484581 Data: 2021.03.12 10:14:49+00'00'

CARTÃO DE CIDADÃO Prof. Dr. Licínio M erreira - Examinador Externo/ Universidade de Coimbra Prof. Dr. Milton Pombo da

de Brasília

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA PROGRAMA DE POS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

2000

Ata de apresentação da 489ª Dissertação de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Ao terceiro día do mês de fevereiro de dois mil e vinte e um às 14:00horas por videoconferência, reuniu-se a Banca Examinadora nas formas e termos do Art. 1º e 2º do Regulamento Interno do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. composta pelos seguintes membros: Prof. Dr. Kepler Borges França (Orientador / UFCG), Prof. Dr. Antonio Carlos Sales Vasconcelos (Examinador Externo / IFMA), Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto (Examinador Interno / UFCG), Prof. Dr. Licínio Manuel Gando Azevedo Ferreira (Examinador Externo / Universidade de Coimbra), e o Prof. Dr. Milton Pombo da Paz (Examinador Externo / Universidade Católica de Brasília), para exame da Dissertação de Mestrado intitulada "Avaliação experimental e computacional da dinâmica dos fluidos de um bioesterilizador para descontaminação ambiental e de pessoas", da aluna Olívia Júlia Silva Gomes. Após a explanação da candidata o Orientador passará a palavra aos componentes da Banca Examinadora. Terminada a arguição a Banca Examinadora, após reunião secreta, a atribuir os conceitos aqui transcritos: Prof. Dr. Kepler Borges França Aprovada . Prof. Dr. Antonio Carlos Sales Vasconcelos Aprovada Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto Aprovada , Prof. Dr. Licínio Manuel Gando Azevedo Ferreira Aprovada e o Prof. Dr. Milton Pombo da Paz . De acordo com o Artigo 57 do Regulamento Interno do Aprovada PPGEQ a candidata foi considerada Aprovada . Encerrada a sessão secreta o Orientador informará o resultado do consenso. Nada mais havendo a tratar foi encerrada a sessão, para constar eu Maricé Pereira da Silva - Secretária do PPGEQ, lavrei a presente Ata que assino com os membros da Banca Examinadora e a candidata.

Secretária:	nauce angise de sube
Orientador:	
Examinador: _	ZAT
Examinador: _	All of BB
	Associado por - LICINIO MANUEL GANDO DE AZEVEDO FERREIRA Num. de Identificação: BI112484581 Data: 2021.02.05 12:01:16+00'00'
Examinador:	CARTÃO DE CIDADÃO
Examinador:	Piller
andidata: 0	ina Schu Silva Gomes

Dedico aos meus pais, Neuma e Antonio, e aos meus irmãos, Antonio Filho, Maria Clara e Gabriela por todo o amor!

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, a Deus que permitiu que tudo isso acontecesse, ao longo de minha vida, e não somente nestes anos como universitária, mas que em todos os momentos é o maior mestre que alguém pode conhecer.

Ao professor, Dr. Kepler Borges França, pela orientação, apoio e confiança na elaboração deste trabalho. Agradeço ao pessoal do LABDES/UFCG pelo tempo e dedicação que foram essenciais ao longo de todo o período da graduação e do mestrado. Especialmente, agradeço ao professor Dr. Antonio Carlos Sales Vasconcelos pelos ensinamentos e inestimável auxílio na realização dos experimentos.

Ao Departamento de Engenharia Química, corpo docente e funcionários administrativos que estiveram prontos a atender às necessidades dos alunos.

Aos meus pais, Neuma e Antônio, pelo amor, incentivo e apoio incondicional. Obrigada meus irmãos, que nos momentos de minha ausência dedicados ao estudo superior, sempre fizeram entender que o futuro é feito a partir da constante dedicação no presente!

Meus agradecimentos aos amigos de vida, companheiros de trabalhos e irmãos na amizade que fizeram parte da minha formação e que vão continuar presentes em minha vida com certeza.

A todos que direta ou indiretamente fizeram parte da minha formação, o meu profundo sentimento de gratidão!

"No meio da dificuldade encontra-se a oportunidade"

(Albert Einstein)

GOMES, O. J. S. Avaliação experimental e computacional da dinâmica dos fluidos de um bioesterilizador para descontaminação ambiental e de pessoas. Dissertação. 69 p. Universidade Federal de Campina Grande; 2021.

RESUMO

O Coronavírus, do subgênero Betacoronavírus, foi isolado pela primeira vez na cidade de Wuhan (China), em dezembro de 2019, de um grupo de pacientes apresentando uma pneumonia aguda não reconhecível. A transmissão da doença ligada às infecções por SARS-CoV-2 está associada ao contato com pessoas infectadas através da emissão de fluidos respiratórios, na forma de gotículas. O presente trabalho tem por objetivo avaliar, por métodos experimentais e computacionais, a dinâmica dos fluidos de um bioesterilizador, dispositivo utilizado para a descontaminação ambiental e de pessoas e apresentado como instrumento de combate à transmissão do Covid-19. Para isso, é proposto desenvolver a arquitetura do sistema de esterilização a vapor; aferir, via sensores digitais de temperatura, o comportamento em estados estacionário e transiente do sistema; elaborar um modelo espacialmente resolvido usando a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para determinar a transferência de calor e massa no interior do volume de controle; validar os gradientes simulados de temperatura por comparação com os dados obtidos experimentalmente; e, por fim, determinar o perfil de velocidade, os gradientes de pressão e a distribuição do vapor no interior da cabine de esterilização. Para a consecução desse objetivo e de seus desdobramentos, é aplicado métodos de experimentação e de simulação computacional. Experimentalmente, emprega-se sensores digitais de temperatura à geometria do dispositivo bioesterilizador (composto por uma cabine e um difusor de vapor), aferidos por tempo e por posição, ao longo de três ensaios em triplicata, em temperaturas diferentes de 40°C, 45°C e 50°C. Computacionalmente, utilizando o software ANSYS Fluent para análise fluidodinâmica. Como passo seguinte, comparase estatisticamente os dados empíricos e as simulações de temperatura. Como resultado, verifica-se que, dentre os três ensaios realizados, o segundo (atribuição de parâmetro de temperatura de entrada fixado em 45°C) apresenta melhor conforto térmico ao usuário da cabine e garante temperatura média mínima para deterioração

das formas microbianas. A partir dos resultados obtidos, conclui-se que há convergência entre as medidas simuladas de temperatura e suas aferições experimentais no interior da cabine bioesterilizadora, o que valida aquelas primeiras. As diferenças entre as temperaturas medidas e simuladas estão abaixo de 0,4 K, com erro médio inferior a 0,5%, o que está abaixo da precisão do sensor de temperatura. Por fim, este trabalho apresenta uma ferramenta computacional desenvolvida para um esterilizador a vapor capaz de prever a temperatura do fluido e seus gradientes ao longo da geometria e de avaliar a produção e a qualidade do vapor, bem como analisar a distribuição de vapor no mesmo.

Palavras - chave: Esterilização a vapor; CFD; COVID-19.

GOMES, O. J. S. Experimental and computational evaluation of the fluid dynamics of a bio-sterilizer for environmental and human decontamination. Dissertation. 69 p. Federal University of Campina Grande; 2021.

ABSTRACT

Coronavirus, of the subgenus Betacoronavirus, was isolated for the first time in the city of Wuhan (China), in December 2019, from a group of patients presenting with an unrecognizable acute pneumonia. The transmission of the disease linked to SARS-CoV-2 infections is associated with contact with infected people through the emission of respiratory fluids, in the form of droplets. The present work aims to evaluate, by experimental and computational methods, the fluid dynamics of a bio-sterilizer, a device used for environmental and human decontamination and presented as an instrument to combat the transmission of Covid-19. For this, it is proposed to develop the architecture of the steam sterilization system; to measure, via digital temperature sensors, the behavior in stationary and transient states of the system; develop a spatially resolved model using Computational Fluid Dynamics (CFD) to determine the transfer of heat and mass within the control volume; validate the simulated temperature gradients by comparison with the data obtained experimentally; and, finally, determine the speed profile, pressure gradients and steam distribution inside the sterilization cabin. To achieve this objective and its consequences, methods of experimentation and computational simulation are applied. Experimentally, digital temperature sensors are used in the geometry of the biosterilizer device (composed of a cabin and a steam diffuser), measured by time and by position, over three tests in triplicate, at temperatures other than 40 °C, 45 °C and 50 °C. Computationally, using ANSYS Fluent software for fluid dynamic analysis. As a next step, empirical data and temperature simulations are compared statistically. As a result, it appears that, among the three tests carried out, the second (assignment of input temperature parameter set at 45 ° C) presents better thermal comfort to the user of the cabin and guarantees a minimum average temperature for the deterioration of microbial forms. From the results obtained, it is concluded that there is a convergence between the simulated temperature measurements and their experimental measurements inside the

biosterilizer cabin, which validates the first ones. The differences between the measured and simulated temperatures are below 0.4 K, with an average error of less than 0.5%, which is below the accuracy of the temperature sensor. Finally, this work presents a computational tool developed for a steam sterilizer capable of predicting the temperature of the fluid and its gradients along the geometry and of evaluating the production and quality of the steam, as well as analyzing the distribution of steam in it.

Keywords: Steam sterilization; CFD; COVID-19.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1. ORGANOGRAMA DO TRABALHO REALIZADO
FIGURA 2. (A) ILUSTRAÇÃO DA VISTA SUPERIOR DO CABINE, (B) ILUSTRAÇÃO DA VISTA
LATERAL DA CABINE E (C) ILUSTRAÇÃO DO PERFIL DA CABINE COBERTA26
FIGURA 3. CICLO DE VIDA DA VALIDAÇÃO DO PROCESSO ENTRE OS TRÊS ESTÁGIOS
(ADAPTADO DE HOFACRE, 2010)28
FIGURA 4. ILUSTRAÇÃO DO ESBOÇO DA CABINE COMPLETA COM VISTA FRONTAL, LATERAL E
FIGURA 5 PROCESSO DE CONSTRUÇÃO DAS CARINES DE ESTERIUIZAÇÃO A VAROR
(LABDES)
FIGURA 6. PRIMEIRO PROTÓTIPO PARCIALMENTE CONSTRUÍDO NA OFICINA DO LABDES30
FIGURA 7. ILUSTRAÇÃO DA VISTA FRONTAL COM A POSIÇÃO DOS SENSORES DIGITAIS DE TEMPERATURA
FIGURA 8. FLUXOGRAMA DAS ETAPAS SEGUIDAS NA METODOLOGIA
FIGURA 9. (A) VISTA FRONTAL, (B) VISTA LATERAL E (C) UMA VISTA 3D DA GRADE NUMÉRICA.
FIGURA 10. FAIXAS DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURAS POR POSIÇÕES (T ₁ = 40°C)42
FIGURA 11. FAIXAS DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURAS POR POSIÇÕES (T ₁ = 45°C)43
FIGURA 12. FAIXAS DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURAS POR POSIÇÕES (T ₁ = 50°C)43
FIGURA 13. MÉDIAS DAS TEMPERATURAS (°C) PELO TEMPO (MIN) EM ESTADO TRANSIENTE.
FIGURA 14. LINHAS DE FLUXO PARA VELOCIDADE DE ENTRADA DE 45 M/S
FIGURA 15. LINHAS DE FLUXO PARA VELOCIDADE DE ENTRADA DE 60 M/S
FIGURA 16. TEMPERATURA MÉDIA DO FLUIDO MEDIDA E SIMULADA PARA (A) ENSAIOS A 40° C,
(B) ENSAIOS A 45°C E (C) ENSAIOS A 50°C
FIGURA 17. ERROS MÉDIOS ENTRE A SIMULAÇÃO CFD E AS MEDIÇÕES DE TODOS OS DOZE
SENSORES DIGITAIS DE TEMPERATURA
FIGURA 18. RENDERIZAÇÃO DE VOLUME DA TEMPERATURA DO FLUIDO NO ESTERILIZADOR A
VAPOR
FIGURA 19. RENDERIZAÇÃO DE VOLUME DA PRESSÃO DO FLUIDO NO ESTERILIZADOR A
VAPOR

LISTA DE TABELAS

A DE COAGULAÇÃO	E TEMPERATURA	DE ÁGUA	ANTIDADE	DA QI	Relação	1.	TABELA
19			E BAKER	LEWITH	ÊNCIA DE İ	PERI	(Exr
IOR DA CABINE PARA	ATURAS DO INTERIO	DE TEMPE	RIBUIÇÃO)S DA DIS	ESULTADO	2. R	TABELA
TROLE DO DIFUSOR.	SISTEMA DE CONT	NTADAS N	S IMPLEME	ERATUR	ITES TEMP	REN	DIFE
41							•••••
PARA DIFERENTES	TEMPERATURAS	IÇÃO DE	DISTRIBU	ADOS D	RESULTA	3.	TABELA
A DE USUÁRIOS44	ENTRADA E SAÍDA	APOR CO	TAÇÃO DO		ATURAS DE	PER	ТЕМ

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	12
1.1.	OBJETIVO GERAL	13
1.2.	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	13
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	15
2.1.	HISTÓRICO	15
2.2.	ESTERILIZAÇÃO vs DESINFECÇÃO	17
2.2.1.	Destruição térmica de microrganismos	18
2.2.2.	Princípios de esterilização por vapor	20
2.2.3.	Contato direto com o vapor	20
2.2.4.	Mecanismo de esterilização por vapor	21
2.3.	MODELAGEM MATEMÁTICA	21
2.4.	ESTADO DA ARTE:	23
3.	METODOLOGIA	25
3.1.	CONFIGURAÇÃO EXPERIMENTAL	26
3.2.	DESENVOLVIMENTO DA ARQUITETURA DO SISTEMA	27
3.2.1.	Esboço, materiais e dimensionamento	27
3.2.2.	Estudo da distribuição de temperatura	30
3.2.3.	Calibração dos sensores digitais de temperatura	32
3.3.	MODELO COMPUTACIONAL	33
3.3.1.	Determinação da malha de elementos a ser utilizada	33
3.3.2.	Modelagem matemática	34
3.3.3.	Modelagem multifásico	35
3.3.4.	Modelagem de transferência de calor	37
3.3.5.	Modelo de evaporação e condensação	39
3.3.6.	Condições de contorno e propriedades do material	40
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO	41
4.1.	ESTUDO DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURAS	41
4.1.1.	Regime estacionário	41
4.1.2.	Regime transiente	44
4.2.	MODELAMENTO MATEMÁTICO	46

4.2.1.	Linhas de fluxo	46
4.2.2.	Pressão e temperatura do fluido no esterilizador a vapor	47
5.	CONCLUSÃO	50
6.	TRABALHOS FUTUROS	52
REFE	RÊNCIAS BIBLIOGRÁFICA	53
ANEX	20S	57

1. INTRODUÇÃO

Neste capitulo será dado um direcionamento, facilitando assim o entendimento dos principais tópicos a serem abordados, ressaltando as razões pelo qual se deu a realização deste trabalho assim como seus objetivos e limitações.

O Coronavírus, do subgênero *Betacoronavírus*, foi isolado pela primeira vez na cidade de Wuhan (China), em dezembro de 2019, de um grupo de pacientes apresentando uma pneumonia aguda não reconhecível, cujos afetados tiveram o único denominador comum na visita ao *Huanan Seafood* Mercado Atacadista (Wuhan, China) (Peeri et al., 2020). Desde a disseminação do COVID-19 na China, os casos relatados no mundo continuaram aumentando na maioria dos países industrializados do mundo (JHU, 2020).

A transmissão da doença ligada às infecções por SARS-CoV-1 está associada ao contato com pessoas infectadas através da emissão de gotículas (Wang et al., 2005). Altas temperaturas, valores baixos ou altos de pH, luz solar e os agentes de desinfecção mais comuns representam uma ferramenta essencial capaz de inativar o vírus. Com base nos dados experimentais disponíveis hoje, não está claro quanto tempo o vírus é capaz de sobreviver em superfícies inanimadas, nem no ambiente.

Como proposta de combate à transmissão, o princípio de funcionamento de um esterilizador a vapor é baseado nas altas taxas de transferência de calor para a superfície de esterilização, que resultam da condensação do vapor nesta superfície de contato. Dessa maneira, a temperatura da superfície quase atinge a temperatura de saturação do vapor que, junto com alto tempo de permanência, gera a desativação dos vírus ou bactérias (Caruso, 2013).

A emergência de saúde pública provocada pela pandemia do Covid-19 tem incentivado o desenvolvimento de soluções em todas as áreas do conhecimento, extrapolando a área de saúde, visto que é um problema classificado como complexo, composto por múltiplas variáveis e requer solução multicritério.

Diante disto, nota-se que a ação proposta por este projeto de pesquisa visa atender os aspectos de cuidados na transmissão por meio da esterilização de ambientes e pessoas, quanto à manutenção das operações nos ambientes. Destacase que o proposto tem alto potencial para ser customizável e adaptável a qualquer situação de contaminação por outros vírus, ou seja, não somente a emergência da situação provocada pela pandemia do COVID-19.

O Laboratório de Referência em Dessalinização (LABDES) da Universidade Federal de Campina Grande (UFCG) propõe o desenvolvimento do projeto como um dos elementos prioritários de combate à contaminação provocada pelo COVID-19, o qual sua futura implantação proporcionará a proteção de ambientes e pessoas que atuam em hospitais, clínicas e laboratórios, ou seja, ambientes médicos que tratam de pacientes contaminados.

1.1. OBJETIVO GERAL

Avaliar, por métodos experimentais e computacionais, a dinâmica dos fluidos de um bioesterilizador, dispositivo utilizado para a descontaminação ambiental e de pessoas e proposto como instrumento de combate à transmissão do Covid-19.

1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- a) Desenvolver a arquitetura do sistema de esterilização a vapor;
- b) Aferir, via sensores digitais de temperatura, o comportamento em estado estacionário e transiente do sistema;
- c) Elaborar um modelo espacialmente resolvido usando a Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para determinar a transferência de calor e massa no interior do volume de controle;

- d) Validar os gradientes simulados de temperatura por comparação com os dados obtidos experimentalmente;
- e) Determinar o perfil de velocidade, os gradientes de pressão e a distribuição do vapor no interior da cabine de esterilização.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capitulo serão abordadas e relatadas as experiências apresentadas por diversos autores que possibilitaram um melhor entendimento do assunto proposto. Aqui se enfatizam alguns temas, visando fortalecer os conhecimentos sobre o problema abordado tais como: a história por trás do descobrimento dos conceitos hoje denominados como esterilização e desinfecção, bem como a diferenciação dos mesmos e o que leva a destruição térmica microbiana além dos princípios e os mecanismos da esterilização a vapor. A modelagem matemática descreve as equações utilizadas no desenvolvimento do modelo computacional de previsão dos parâmetros estudados, dando ênfase a previsão dos gradientes de temperatura e pressão no interior da cabine de esterilização a vapor.

2.1. HISTÓRICO

O desenvolvimento da microbiologia está intimamente relacionado ao conhecimento obtido ao longo do tempo sobre esterilização. O crescimento dos conceitos de esterilização acompanhou passo a passo a tentativa de solucionar os problemas encontrados com o surgimento da microbiologia.

O homem foi desenvolvendo e aplicando processos de purificação e desinfecção desde o início das civilizações humanas, tais como o piche ou alcatrão, como resinas e aromáticos, substâncias largamente utilizadas pelos egípcios no embalsamento de corpos. Há indicações, do trabalho de Heródoto (484 – 24 a.c), de que os egípcios detinham de conhecimento sobre os conceitos anticépticos do ressecamento resultante do emprego de produtos como o sal comum. Ainda a fumaça que era gerada da queima de produtos químicos também era aplicada pelos mais antigos com o intuito de desodorizar e desinfetar.

Os egípcios também podem também ter originado a purificação de ambientes e a destruição de materiais nocivos e infecciosos através do fogo. A cremação de corpos, em particular nas épocas de guerras, foi utilizado pelos mais antigos como forma de descarte, bem como uma forma de se acabar com odores desagradáveis.

O descobrimento da bactéria ocorreu após o desenvolvimento e a construção de equipamentos adequados à observação e estudo em escala cada vez menores, o microscópio. Leeuwenhoek, em 1863, constatou e detalhou formas microbianas em vários fluidos corporais, como também na água e na cerveja. As observações por ele realizadas e com o desenvolvimento do microscópio foram precursores da bacteriologia e fez novamente a discussão sobre fermentação e doenças virem à tona (Perkins, 1983).

Ainda seguindo os novos avanços, questões relacionadas a geração espontânea de seres vivos microscópicos tornou-se objeto de pesquisa dentro o meio de estudiosos da época. Até que em 1862, Louis Pasteur concluiu suas discussões de que bactérias se geravam espontaneamente em sistemas fechados.

Ainda em 1860, Pasteur expunha suas pesquisa sobre a causa microbiana da fermentação e partia para iniciar seus estudos sobre o problema da geração espontânea. Através de uma investigação microscópica do ar atmosférico, e com a ajuda dos dispositivos mais engenhosos da época, foi possível demonstrar que o ar, em diferentes posições, diferenciava em seu conteúdo de microrganismos. Ainda pode-se comprovar antigas hipóteses criadas e testadas por Schwann, Schroeder e Von Dusch, onde mostrou-se que após atravessar o ar por de um filtro de algodão, este detinha partículas organizadas semelhantes em aparência a esporos e, se estas partículas fossem postas em meios estéreis e nutritivos, era induzida a fermentação.

Com o objetivo de alcançar as exigências de métodos mais efetivos e eficazes de esterilização, com temperaturas superiores às temperaturas de ebulição, Pasteur foi levado a desenvolver novos dispositivos e equipamentos. Entre o período de 1876 e 1880, Charles Chamberland, pupilo de Pasteur, foi responsável por inventar o primeiro esterilizador à pressão de vapor (autoclave), com o qual era possível atingir temperaturas iguais ou superiores a 120°C (Metchnikoff, 1989).

Em pesquisas de Koch, em 1881, onde tinha como tema central as propriedades desinfetantes do vapor e do ar quente marcam o início da ciência da desinfecção e esterilização. Ainda em colaboração com Wolffhügel comprovou a diferença acentuado do efeito do calor seco sobre o microrganismo em comparação com o calor úmido.

Os pesquisadores determinaram que era necessário temperaturas mais altas e tempo de exposição maior quando utilizada de calor seco para destruir bactérias vegetativas ou esposos mais resistentes (como Antrax) em relação a esterilização com água fervente.

2.2. ESTERILIZAÇÃO vs DESINFECÇÃO

Desinfecção é o processo que elimina todos os microrganismos ou objetos inanimados patológicos, com exceção dos endósporos bacterianos. Esse processo não deve ser confundido com a *esterilização*, visto que não elimina totalmente todas as formas de vida microbiana. Por definição, os dois procedimentos diferem quanto à capacidade para eliminação dos esporos, propriedade inerente à esterilização. Alguns desinfetantes, os quimo esterilizadores, podem eliminar esporos com tempo de exposição prolongado (seis a dez horas).

Em concentrações similares, esses mesmos desinfetantes, em período de exposição menor do que 30 minutos, por exemplo, podem eliminar microrganismos vivos, com exceção dos endósporos bacterianos, sendo então denominados desinfetantes de alto nível. Outros podem destruir bactérias vegetativas, fungos e vírus lipofílicos em aproximadamente dez minutos (desinfetantes de baixo nível) e há os que destroem o bacilo da tuberculose e vírus hidrofílicos em períodos algo superiores a 30 minutos (desinfetantes de nível intermediário). Feitas essas considerações, pode-se concluir que os germicidas diferem entre si basicamente quanto ao espectro antimicrobiano e à rapidez com que agem.

O mecanismo de morte ainda não é bem conhecido, mas existem diversas teorias:

1. Tradicional: a morte bacteriana é estritamente relacionada a alterações de proteína envolvendo algumas mudanças protoplasmáticas irreversíveis na célula

bacteriana;

 A morte é devida a inativação de enzimas vitais ou algum sistema enzimaproteico da célula;

3. Mais recentemente: o conceito de morte bacteriana pela ação do calor é atribuída a desnaturação ou coagulação de uma proteína que contenha a estrutura genética da célula. Este efeito está intimamente relacionado com a morte da célula.

2.2.1. Destruição térmica de microrganismos

Tomando-se por base o fato de que a temperatura ideal para o desenvolvimento e crescimento de organismos vivos vai de – 45°C a 80°C, podemos concluir que a exposição a temperaturas além desta faixa resultará, provavelmente, na morte destes organismos, com exceção dos esporos resistentes ao calor. Acredita-se que o limite superior desta faixa de temperatura seja determinado pela instabilidade dos constituintes químicos da matéria viva, mais precisamente as proteínas e os ácidos nucléicos, sendo estas substâncias rapidamente destruídas, ou desnaturadas, a temperaturas na faixa de 50°C a 90°C.

O mecanismo responsável pela morte dos microrganismos quando sujeitos ao calor ainda não é claramente entendido. A teoria tradicional prega que a morte de bactérias a temperaturas elevadas esteja intimamente relacionada a alterações em proteínas, gerando alterações protoplasmáticas irreversíveis no interior da célula da bactéria. Alguns pesquisadores afirmam que a morte está associada à inativação por calor de algumas enzimas ou sistemas enzima-proteína na célula. Os outros mecanismos que atuam quando a bactéria é destruída a altas temperaturas tiveram avanço graças aos trabalhos de Chick (1906). As medições quantitativas originais de Chick contribuíram enormemente para a evolução de uma ferramenta muito útil conhecida como ordem logarítmica da morte de bactérias.

Estudos mais recentes nos levam a crer que o modo de ação do calor sobre a bactéria é bastante semelhante à coagulação de proteínas pelo calor. Suportando este

ponto de vista, Amaha e Sakagushi concluíram que a causa da morte dos esporos bacterianos submetidos ao calor úmido possa ser atribuída à desnaturação de uma molécula proteica essencial à célula do esporo (Amaha e Sakagushi, 1957). Deste modo, é bastante razoável concluirmos que o efeito da umidade sobre a temperatura de coagulação da proteína precisa guardar alguma relação com a temperatura na qual a bactéria é destruída. Este ponto de vista foi investigado por Lewith, que detectou o fato das proteínas serem coaguladas pelo calor a temperaturas mais baixas quando estas contêm uma quantidade maior de água (Lewith, 1890). Além disso, quando o vapor encontra-se presente, as bactérias são destruídas sob temperaturas bem menos elevadas e em períodos bem mais curtos, diferentemente de quando há ausência de vapor. Este fenômeno pode ser explicado se levarmos em conta que todas as reações químicas, incluindo aqui a coagulação de proteínas, são catalisadas pela presença de água.

Lewith (1890) e Baker (1933-34) provaram que a proteína coagula a temperatura mais baixa, quanto maior for a umidade. Esse fenômeno é explicado com base em que todas as reações químicas, incluindo coagulação proteica, são catalisados em presença de água.

Matéria	Quantidade de água	Temperatura de coagulação
Proteína +	50%	56°C
	25%	74°C – 80°C
	18%	70°C – 90°C
	6%	145°C
	0%	160°C – 170°C

Tabela 1. Relação da quantidade de água e temperatura de coagulação (Experiência de LEWITH e BAKER).

Tanto os vírus como as formas vegetativas têm o seu limite de resistência ao calor variando desde 50°C em exposição ao vapor aquecido, até 150°C em exposição ao calor seco. No entanto, entre os vírus, existe maior variação entre as temperaturas letais de acordo com os diferentes tipos de vírus.

2.2.2. Princípios de esterilização por vapor

Vapor aquecido sob forma de vapor saturado sob pressão é o meio mais seguro de destruição de todas as formas vivas microbianas. O poder de ação está baseado em dois fatores: umidade e calor.

- ✤ Vantagens:
- 1. Aquecimento rápido e boa penetração nos tecidos;
- Destruição das bactérias mais resistentes (esporos) em breve intervalo de tempo;
- 3. Fácil avaliação do desgaste do material;
- 4. Não há resíduo tóxico durante o processo de esterilização;
- 5. Agente esterilizante mais econômico.
 - Limitações:
- Eliminação incompleta de ar da autoclave ocasiona diminuição da temperatura e impede a esterilização. O ar não permite a expansão do vapor.
- 2. Qualquer defeito de aparelho ou uso incorreto pode acarretar superaquecimento do ar e diminuição do poder microbicida.
- 3. Método impróprio para esterilização de óleos, anidros, pós e graxas.

Para o bom conhecimento da esterilização, é necessário compreender as propriedades físicas e térmicas em que se baseiam a produção e controle do calor.

2.2.3. Contato direto com o vapor

Toda a esterilização por vapor é baseada no contato direto do vapor com todo o material, inclusive fibras ou partículas no material de densidade, e o processo de condensação se realiza nesse nível.

Os materiais de superfície também são sujeitos ao mesmo processo de condensação. Nesses objetos não há penetração através do material e o metal frio condensa o vapor até que o instrumento aquecido atinja a temperatura do vapor. Esse processo facilita a esterilização, sendo o tempo de exposição bem menor.

2.2.4. Mecanismo de esterilização por vapor

O mecanismo de esterilização por vapor se baseia em todos os princípios já citados; no entanto, os dois princípios mais importantes são o calor latente e o contato direto com o vapor ou umidade. O vapor sob pressão penetra nas substâncias porosas e leva consigo calor.

Esse vapor ao entrar em contato com a superfície fria do material, se condensa libertando o calor latente. Este calor é o responsável pela desnaturação dos microrganismos que lá existam.

Após a condensação do vapor, devido ao constante contato com vapor e temperaturas altas, a água formada tornará a voltar ao estado gasoso e o calor latente será absorvido novamente a fim de possibilitar essa mudança de estado. Essa troca de calor entre o meio e o objeto a ser esterilizado é a base da esterilização. Para que isso seja possível, há necessidade de se estabelecer padrões no preparo e acondicionamento do material a ser esterilizado, principalmente no que diz respeito ao tamanho do pacote de material de densidade.

2.3. MODELAGEM MATEMÁTICA

Um solucionador baseado em pressão de precisão dupla foi usado para obter soluções transitórias das equações de Navier-Stokes para continuidade e momento.

O fluxo multifásico dentro do esterilizador a vapor foi modelado com um modelo multifásico Euleriano considerando duas fases (vapor d'água e água líquida). A turbulência no esterilizador a vapor foi modelada com o modelo realizável k-ε, que foi publicado pela primeira vez por Shih et. al (1995).

A densidade do vapor foi modelada com a lei dos gases ideais para reduzir o esforço numérico. Existe muita literatura sobre a diferença entre as propriedades ideais do gás e as propriedades reais do gás para o vapor. Borgnakke e Sonntag (2014), por exemplo, mostraram que o desvio máximo entre os valores medidos e os valores calculados com a lei dos gases ideais é inferior a 1,5% até uma pressão de 1 bar. Klein e Nellis (2012) relatam que o desvio máximo para uma pressão de 3,16 bar também é menor que 2% entre os volumes específicos medidos e os volumes específicos calculados com a lei dos gases ideais.

O diâmetro da gota da fase secundária foi ajustado para 0,1 μm. Este diâmetro das gotas de água no vapor é muito difícil de medir. White (2000), por exemplo, investigou a condensação em uma camada limite. White descobriu que, neste caso, o diâmetro da gotícula médio é de aproximadamente 0,07 μm. Ryley e Al-Azzawi (1983) investigaram o mesmo tópico. Eles descobriram que o diâmetro médio da gotícula é de aproximadamente 0,1 μm.

No presente trabalho, os efeitos de evaporação e condensação entre as duas fases foram simulados com o modelo de Lee. O modelo de Lee (1980) é uma técnica numérica simples, publicada pela primeira vez. A condensação e evaporação no modelo são dadas com a equação de transporte de vapor Eq. 1.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_{\nu}\rho_{\nu}) + \nabla(\alpha_{\nu}\rho_{\nu}\overrightarrow{v_{\nu}}) = \dot{m}_{l\nu} - \dot{m}_{\nu l}$$
(1)

onde α_v representa a fração de volume, ρ_v , a densidade e $\vec{v_v}$ a velocidade da fase de vapor. \dot{m}_{lv} representa a transferência de massa devido à evaporação, \dot{m}_{vl} representa a transferência de massa devido à condensação. O modelo de Lee funciona em dois regimes de temperatura. No primeiro regime de temperatura, a temperatura do líquido

 T_l é superior à temperatura de saturação T_{sat} . Nesse caso, ocorre a transferência de massa do líquido para a fase de vapor \dot{m}_{lv} (evaporação) (ver Eq. 2).

$$\dot{m}_{lv} = cof f_{lv} \cdot \frac{\alpha_l \rho_l (T_l - T_{sat})}{T_{sat}} , T_l > T_{sat}$$
(2)

No segundo regime de temperatura, a temperatura de vapor T_v é mais baixa do que a temperatura de saturação T_{sat} . A transferência de massa da fase de vapor para a fase líquida ocorre $m_{lv} = coef f_{vl}$ (ver Eq. 3).

$$\dot{m}_{lv} = cof f_{vl} \cdot \frac{\alpha_v \rho_v (T_{sat} - T_v)}{T_{sat}} , T_v < T_{sat}$$
(3)

Os coeficientes *coef* f_{lv} e *coef* f_{vl} descrevem a rapidez com que ocorre a mudança de fase. Esses dois coeficientes são muito sensíveis e difíceis de detectar.

2.4. ESTADO DA ARTE:

No passado, uma ampla área de pesquisadores investigou o ciclo de esterilização a vapor experimentalmente. Lapanaitis et al. (2018), por exemplo, investigaram a relação entre a duração do ciclo de esterilização a vapor e o peso da carga. O trabalho de Kaiser (2005) mostra a influência dos gases não condensáveis no ciclo de esterilização a vapor.

Por outro lado, poucos artigos foram publicados que investigam numericamente os ciclos de esterilização a vapor. Lau et al. (2015) desenvolveu um modelo numérico unidimensional para simular as temperaturas em um esterilizador a vapor, bem como a temperatura de carga. Feurhuber et al. (2017) desenvolveram um modelo de CFD para prever a temperatura do fluido, bem como a temperatura da carga em um esterilizador a vapor para carga embalada.

As primeiras simulações de CFD para investigar o fluxo de fluido multifásico, a transferência de calor e outros fenômenos de transporte que ocorrem nos esterilizadores a vapor foram publicadas por Feurhuber et al. (2017). A limitação deste estudo anterior é que o modelo CFD desenvolvido não é capaz de prever a transferência de calor devido à condensação da parede na presença de gases não condensáveis. Como resultado dessa limitação, os autores deste trabalho foram motivados a desenvolver um modelo de CFD capaz de prever a transferência de calor no presente dos gases não condensáveis, inclusive em cargas ocas (cavidades).

3. METODOLOGIA

Nas seções anteriores foram apresentados conceitos e fundamentos que deram suporte ao entendimento do presente trabalho. Nesta seção serão apresentados as configurações utilizadas tanto para os experimentos realizados como uma modelagem capaz de prever a temperatura do fluido e seus gradientes ao longo da geometria e permite avaliar a produção e a qualidade do vapor, bem como analisar a distribuição de vapor no mesmo usando o código comercial ANSYS Fluent R15. Serão assumidas as seguintes considerações: não há reações químicas, fluido incompressível, escoamento turbulento e não-isotérmico.

Na Figura 1 representa o fluxograma das etapas do trabalho realizado na validação dos dados experimentais utilizando de ferramentas computacionais de prever parâmetros importantes para o processo, como temperatura e pressão.





O Laboratório de Referência em Dessalinização – LABDES/UFCG, ambiente de trabalho desta dissertação, dispõe de informações referentes aos equipamentos e suprimentos necessários a realização do ensaio da distribuição do vapor no interior da cabine para investigação dos gradientes de parâmetros.

3.1. CONFIGURAÇÃO EXPERIMENTAL

Os dados de medição transitória da temperatura do fluido são necessários para validar os resultados do CFD. Estes foram obtidos usando um cabine de esterilização a vapor projetada e construída no LABDES. A cabine esterilizadora a vapor (ver Figura 2) tem formato retangular (3,00 m de comprimento x 1,70 m de largura x 2,44 m de altura), ainda possui uma inclinação de 15° no teto com a finalidade de otimizar o escoamento do vapor condensado nas paredes. O difusor é montado na lateral exterior ao esterilizador para distribuir o vapor dentro do esterilizador.

Figura 2. (a) Ilustração da vista superior do cabine, (b) ilustração da vista lateral da cabine e (c) ilustração do perfil da cabine coberta.



3.2. DESENVOLVIMENTO DA ARQUITETURA DO SISTEMA

O BioEsterizador é composto por uma estrutura metálica de alumínio coberto com plástico tipo lona transparente vinil de PVC. Possui uma área coberta de 5 m², com 3,0 metros de comprimento e piso formado por peças modulares de plásticos antiderrapantes que atendem as normas da ANVISA, as quais se encontram encaixadas uma a outra de (50 cm x 50 cm x 5 cm de altura).

O vapor produzido pelo equipamento é distribuído no interior da cabine, através de uma tubulação metálica de aço inox que fica no interior do piso. O condensado produzido durante o processo é recolhido por tubulações de PVC que ficam instaladas na base da cabine e recolhido através de uma mangueira conectada as tubulações. A entrada da cabine e a saída são compostas de portas do mesmo material plástico com indicadores.

- Precauções
- a) As pessoas que tem dificuldades de caminhar e/ou cadeirantes e
- b) As que usam óculos estas devem retirá-los e serem acompanhas com outra pessoa do estabelicimento ou parente, quando for atravessar a cabine

3.2.1. Esboço, materiais e dimensionamento

A validação do processo deve recolher e avaliar os dados desde a fase de design do processo até à produção comercial. Esta envolve uma série de atividades que ocorrem durante o ciclo de vida do produto e do processo. As atividades dividemse em três etapas (USDHHS et al., 2011; PRABU et al., 2014):

 Design do processo: o processo de fabricação comercial é definido durante esta fase com base no conhecimento adquirido através do desenvolvimento e atividades de scale-up. 2. *Processo de qualificação:* durante esta fase, o design do processo é avaliado para determinar se o processo é capaz de fabricação comercial reprodutível.

3. *Verificação contínua do processo:* segurança na continuidade é adquirida durante a produção de rotina que o processo permanece num estado de controlo.

As principais etapas e as respetivas atividades são esquematizadas na Figura 3 e descritas em seguida:

Figura 3. Ciclo de vida da validação do processo entre os três estágios (adaptado de Hofacre, 2010).



Nesse estudo, a primeira etapa são definidos requisitos relevantes para o produto, como funções do sistema (sistemas de controle, alarmes), *design*, construção e instalação. O esboço foi feito em escala 1:25 com vistas frontal, lateral e superior (ver Figura 4).

Figura 4. Ilustração do esboço da cabine completa com vista frontal, lateral e superior.



A Figura 5 mostra o processo de construção das cabines de esterilização a vapor foi realizado na oficina do Laboratório de Referências em Dessalinização (LABDES/UFCG) pela equipe responsável.

Figura 5. Processo de construção das cabines de esterilização a vapor (LABDES).



A estrutura possui barras metálicas de alumínio e é recoberto com material plástico de náilon reforçado próprio para o calor. O difusor fica na parte exterior lateral da cabine. O vapor produzido é transportado por uma mangueira de aço inox de 2 m de comprimento, a qual possui orifícios de 2 cm de diâmetro a distancias regulares de 10 cm com a finalidade de otimizar a distribuição do vapor no interior da cabine.



Figura 6. Primeiro protótipo parcialmente construído na oficina do LABDES.

No primeiro protótipo parcialmente construído (Figura 6), houve a necessidade de projetar um sistema para as portas funcionais de forma que possibilite o transito de pessoas com diversas condições de mobilidade e ao mesmo tempo não altere o comportamento da distribuição do vapor no interior da cabine. Então, optou-se por utilizar cortinas que parcialmente se sobrepõem na entrada e na saída da cabine.

3.2.2. Estudo da distribuição de temperatura

Para as medições da temperatura do fluido, doze sensores digitais de temperatura tipo DS18B20 são uniformemente distribuídos sobre uma estrutura de

tubos PVC em forma de matriz, conforme a ilustração da Figura 7. Esta estrutura se desloca ao longo do comprimento da cabine puxada por um sistema de cordas. A finalidade do deslocamento é obter o perfil da temperatura em pontos tridimensionalmente localizados.

Figura 7. Ilustração da vista frontal com a posição dos sensores digitais de temperatura.



Para maior precisão entre os sensores digitais de temperatura usados, é realizada a calibração em uma câmara fechada com temperatura controlada e dentro da faixa de atuação dos sensores ($15^{\circ}C - 140^{\circ}C$). Através da linearização da curva de temperatura de cada sensor, a precisão é dada com ± 1 K.

Durante o experimento em estado estacionário, as portas estão sempre fechadas. Já para o distúrbio de entrada e saída da cabine, é verificada a variação da temperatura de acordo com o tempo de permanência do indivíduo no interior da mesma.

Os dados são analisados estatisticamente por tempo e por posição (50 cm de distância), em triplicata, e em temperaturas diferentes: 40°C, 45°C e 50°C. Estes são adquiridos a cada 15 segundos, durante 20 minutos, após a temperatura da cabine se estabilizar. Os dados foram adquiridos por um aquisitor de Arduino Mega 2560 R3 onde os mesmos são armazenados de forma *online*.

3.2.3. Calibração dos sensores digitais de temperatura

São utilizados sensores digitais de temperatura tipo DS18B20 (4,7 cm) de comprimento e 1/16" de espessura (SONOFF, USA). Estes sensores digitais de temperatura são conectados a um sistema de aquisição de dados Arduino Mega 2560 R3, no qual os mesmos são armazenados na nuvem usando uma planilha Excel *online* em tempo real.

Os sensores digitais de temperatura foram calibrados na faixa de 60 a 130°C, variando-se a temperatura de 5 em 5 graus, em um banho digital Cole-Parmer® Polystat® com precisão de ± 0,01°C. Utilizou-se como temperatura de referência para a calibração a temperatura do RTD do banho e após a estabilização de cada temperatura foram tomadas 20 medidas. As equações de calibração foram obtidas por regressão linear, utilizando-se o software Microsoft Excel.

3.3. MODELO COMPUTACIONAL

As simulações neste estudo foram realizadas com o ANSYS Fluent R15. As atividades desenvolvidas utilizam da metodologia aqui descrita seguindo as seguintes etapas:

Figura 8. Fluxograma das etapas seguidas na metodologia.



3.3.1. Determinação da malha de elementos a ser utilizada

A malha foi gerada com *Design modeler* e o *Meshing*. Foi criada uma malha computacional com 684.478 elementos piramidais e prismáticos, incluindo todo o volume de fluido do bioesterilizador e o difusor. A distorção máxima da malha foi de 0,859 enquanto a proporção máxima foi de 20,24. A malha, incluindo todos os sólidos, pode ser vista na Figura 9.

Vários cálculos com tamanhos de malha diferentes foram realizados para verificar a independência de malhas. O número de células foi aumentado para 1.445.982 em todo o esterilizador a vapor. A influência de mais células na temperatura e outras variáveis de fluxo, como velocidade e transferência de calor, foi examinada. A temperatura da carga entre as duas malhas foi monitorada e comparada. O desvio da temperatura entre essas duas malhas ficou abaixo de 0,2 K que está na incerteza dos sensores digitais de temperatura (± 1 K). Neste trabalho, o bioesterilizador foi

analisado pela primeira malha, com 684.478 elementos, por apresentar menor esforço numérico e resultados compatíveis.



Figura 9. (a) Vista frontal, (b) vista lateral e (c) uma vista 3D da grade numérica.

3.3.2. Modelagem matemática

O esquema de interpolação para a simulação foi um esquema *upwind* de segunda ordem em relação aos escalares para massa, momento, energia cinética

turbulenta, taxa de dissipação turbulenta e energia. O esquema de interpolação para a densidade e a fração de volume foi *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics* (QUICK). O método *Least Squares Cell Based* foi usado para determinar os gradientes. O acoplamento da velocidade e pressão foi clone pelo Método Semi-Implícito Acoplado por Fase para Equações Ligadas à Pressão (SIMPLE), no entanto, a formulação transitória foi Implícita de Segunda Ordem. A fase primária foi o vapor, enquanto a fase secundária foi a água.

A simulação foi realizada com intervalo de tempo de 0,01 s. O número máximo de iterações por intervalo de tempo foi definido como 35. Isso leva a um número total de mais de 740.000 iterações.

3.3.3. Modelagem multifásico

O fluxo turbulento multifásico dentro do esterilizador a vapor foi modelado resolvendo as equações de Navier-Stokes com média de Reynolds para massa, momento e energia, bem como equações adicionais para turbulência e efeitos de evaporação e condensação. A turbulência foi considerada com o modelo realizável k- ϵ , publicado pela primeira vez por Shih et al. (1995). O escoamento multifásico foi modelado com um modelo Euleriano-Euleriano bifásico. A equação de continuidade foi resolvida para cada fase separada: para massa (veja Eq. 4), momento (veja Eq. 5) e energia (veja Eq. 6). Eq. 4 mostra a equação de continuidade de massa para a q-ésima fase:

$$\frac{1}{\rho_{rq}} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v_q}) = \sum_{p=2}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \right)$$
(4)

onde ρ_{rq} é a densidade média, α_q é a fração de volume e \vec{vq} é o vetor velocidade da q-ésima fase. \dot{m}_{qp} caracteriza a transferência de massa da q-ésima para a p-ésima

fase. A equação para a conservação do momento é mostrada na Eq. 5:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \vec{v_q}) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v_q} \vec{v_q}) = -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g}$$

$$+ \sum_{p=2}^n (K_{pq} (\vec{v_p} - \vec{v_q}) + \dot{m}_{pq} \vec{v_{pq}} - \dot{m}_{qp} \vec{v_{qp}}) + (\vec{F_{vm,q}} + \vec{F_{td,q}})$$

$$(5)$$

onde $\bar{\bar{\tau}}_q$ é o tensor tensão-deformação da q-ésima fase. K_{pq} é o coeficiente de troca do momento da interfase, v_{pq} e v_{qp} são as velocidades da interfase. $\vec{F}_{vm,q}$ e $\vec{F}_{td,q}$ são a força de massa virtual e a força de dispersão turbulenta, respectivamente.

Para descrever a conservação de energia em aplicações multifásicas Eulerianas, a Eq. 6 foi resolvido para cada fase.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_{q}\rho_{q}h_{q}) + \nabla \cdot (\alpha_{q}\rho_{q}\overrightarrow{v_{q}}h_{q}) = \alpha_{q}\frac{dp_{q}}{dt} + \overline{\overline{\tau}}_{q}:\nabla \overrightarrow{u}_{q} - \nabla \cdot \overrightarrow{q}_{q} + \sum_{p=2}^{n} (Q_{pq} + \dot{m}_{pq}h_{pq} - \dot{m}_{qp}h_{qp})$$
(6)

Na Eq. 6, $\vec{q_q}$ representa o fluxo de calor, Q_{pq} é a intensidade da troca de calor entre a p-ésima e a q-ésima fase, e h_{pq} é a entalpia de interfase. Uma descrição mais detalhada da conservação de massa, momento e energia pode ser encontrada na literatura (ANSYS *Fluent Theory Guide*, 2016).

A fase primária foi configurada para vapor, enquanto a fase secundária foi configurada para gotículas de água. As propriedades do material de todas as fases foram definidas com valores estabelecidos na literatura (*VDI-Wärmeatlas*, 2013). As propriedades do material foram adicionadas ao código CFD usando polinômios por partes.

Um solver baseado em pressão de precisão dupla foi usado para alcançar uma

solução transitória convergente. Para todos os escalares, um esquema de interpolação de segunda ordem foi aplicado, exceto para a fração de volume, onde foi usado o esquema *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics* (QUICK). Os critérios de convergência para a simulação não foram apenas resíduos baixos (abaixo de 10⁻⁵), mas também monitores de pressão, temperatura e frações de volume.

3.3.4. Modelagem de transferência de calor

Modelar a transferência de calor induzida pela condensação da parede não é trivial para simulações CFD. Uma malha muito fina é necessária para calcular os coeficientes de transferência de calor diretamente na parede. Zschaeck et al. (2014) desenvolveram um modelo para prever a transferência de calor devido à condensação da parede. Feurhuber et al (2017) decidiram desenvolver um modelo muito eficiente em termos de tempo, a fim de economizar custos computacionais. A abordagem desenvolvida é baseada no fator de argumento convectivo (CAF), que é definido pela razão do número real de Nusselt (Nu) para a condensação da parede dividido pelo número de Nusselt do fluxo ideal (fluxo Nu_{ideal}) (ver Eq. 7).

$$CAF = \frac{Nu}{Nu_{ideal}} \tag{7}$$

O número de Nusselt do fluxo ideal é o número de Nusselt devido à convecção calculado a partir do modelo CFD. Este número de Nusselt é baseado nas velocidades locais e funções de parede. Para determinar o número de Nusselt real, Feurhuber *et al* (2017) desenvolveu um UDF que analisa dois casos diferentes em cada célula perto da parede do domínio do fluido. Os cálculos mostraram que o fator de argumento convectivo (CAF) tem um valor de aproximadamente 3.200 ao longo de toda a fase de esterilização.

As análises dos dois casos são mostradas na Eq. 8.

 $Nu = \begin{cases} Nu_{ideal}, & para T_{parede} \ge T_{sat} \\ Nu_{ideal} \cdot CAF, & para T_{parede} < T_{sat} \end{cases}$ (8)

No primeiro caso, a temperatura da parede (T_{parede}) é maior ou igual à temperatura de saturação do vapor (T_{sat}). Nesse caso, a transferência de calor só acontece devido à convecção e, portanto, o número de Nusselt foi ajustado para o número de Nusselt calculado devido à convecção. No segundo caso, a temperatura de saturação do vapor é superior à temperatura da parede, o que resulta na condensação da parede. Portanto, o número de Nusselt foi definido como o número de Nusselt calculado em *Fluent* multiplicado pelo fator de argumento convectivo (Feurhuber *et al*, 2017).

O valor do fator de argumento convectivo foi obtido por Feurhuber et al (2017) pelo cálculo do número de Nusselt em uma placa plana vertical para convecção e para condensação de parede com uma fórmula analítica. Eq. 9 mostra a fórmula analítica que foi usada para o cálculo do número de Nusselt para convecção.

$$Nu = \left(0.825 + 0.387 \cdot Ra^{\frac{1}{6}} \cdot \left(1 + 0.671 \cdot \Pr^{-\frac{9}{16}}\right)^{-\frac{8}{27}}\right)^2$$
(9)

Na Eq. (9), *Ra* representa o número de Rayleigh e *Pr* representa o número de Prandtl. O número de Nusselt para a condensação da parede foi calculado por Feurhuber *et al* (2017) com a Eq. 10.

$$Nu = 0.943 \cdot \frac{g \cdot r \cdot (\rho_w - \rho_s) \cdot L^3}{\left(\lambda_w \cdot \nu_w \cdot (T_{sat} - T_{parede})\right]^{\frac{1}{4}}}$$
(10)

Onde L representa o comprimento da placa vertical, g a gravidade, r a entalpia de evaporação, ρ_w é a densidade da água e ρ_s é a densidade do vapor. λ_w representa a

condutividade térmica da água, v_w representa a viscosidade da água, T_{sat} e T_{parede} representam a temperatura de saturação e a temperatura da parede.

3.3.5. Modelo de evaporação e condensação

Uma técnica numérica simples, publicada pela primeira vez por Lee em 1980. A transferência de massa devido à evaporação (fase líquida para fase vapor) \dot{m}_{lv} foi considerada no modelo se a temperatura do líquido T_l exceder o valor da temperatura de saturação T_{sat} .

$$\dot{m}_{l\nu} = r_{l\nu} \cdot \alpha_l \cdot \rho_l \, \frac{T_l - T_{sat}}{T_{sat}} \tag{11}$$

Na Eq. 11, α_l representa a fração de volume da fase líquida e ρ_l representa a densidade da fase líquida. r_{lv} representa o coeficiente de evaporação do modelo de Lee. Se a temperatura de vapor T_v for inferior à temperatura de saturação T_{sat} em qualquer ponto específico dentro do esterilizador a vapor, ocorre a condensação. A transferência de massa para a condensação (fase de vapor para a fase líquida) \dot{m}_{lv} é calculada da seguinte maneira (Eq. 12).

$$\dot{m}_{\nu l} = r_{\nu l} \cdot \alpha_{\nu} \cdot \rho_{\nu} \frac{T_{sat} - T_{\nu}}{T_{sat}}$$
(12)

Os coeficientes r_{lv} e r_{vl} são muito sensíveis dependendo do caso respectivo. Lee (1980) realizou alguns experimentos individuais para investigar esse coeficiente. O coeficiente de condensação é semelhante a uma frequência e descreve a velocidade na qual a mudança de fase ocorre.

Neste estudo, os coeficientes de condensação r_{vl} foram investigados para 2 s⁻¹, 20 s⁻¹, 200 s⁻¹, 2000 s⁻¹ e 10.000 s⁻¹. O coeficiente v_l = 200 s⁻¹ foi considerado compatível com os dados experimentais.

3.3.6. Condições de contorno e propriedades do material

Um gerador de vapor que aumenta a temperatura dentro do esterilizador para temperatura selecionada no painel de controle da cabine foi modelado com uma entrada de pressão. A posição da entrada e da saída pode ser observada na Figura 2. A saída permanece fechada durante toda a simulação do ciclo de esterilização.

A temperatura do fluido foi inicializada de acordo com a temperatura do ponto de ebulição da água a pressão ambiente (100°C a 1 atm). As temperaturas das paredes da cabine foram definidas de acordo com as medições da temperatura média do laboratório, conforme termômetro fixado no ambiente. De acordo com o número de Reynolds, o fluxo dentro do esterilizador a vapor é turbulento. A identidade da turbulência e o diâmetro hidráulico na entrada foram ajustados para 5% e 0,005 m.

As propriedades do material de todos os materiais usados para este trabalho, bem como as propriedades do material dos fluidos, podem ser vistas no Anexo 1.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesse capítulo serão analisados e discutidos os resultados obtidos da distribuição de temperaturas para o processo de esterilização a vapor e sua aplicabilidade ao combate à transmissão do Covid-19.

4.1. ESTUDO DA DISTRIBUIÇÃO DE TEMPERATURAS

4.1.1. Regime estacionário

A Tabela 2 apresenta um resumo dos resultados obtidos nos três ensaios de distribuição de temperaturas no interior da cabine. Esses dados correspondem aos diferentes valores do parâmetro implementado no sistema de controle do difusor, que são, respectivamente, 40°C, 45°C e 50°C.

Tabela 2. Resultados da distribuição de temperaturas do interior da cabine para diferentes temperaturas implementadas no sistema de controle do difusor.

Parâmetro	40°C	45°C	50°C
Temperatura média (°C)	50,74	59,12	65,82
Desvio padrão entre médias (°C)	5,79	4,58	6,55
Ponto de aquecimento mais lento	Fundo	Fundo	Fundo
Temperatura média da posição mais fria (°C)	41,92	49,65	55,34

Pelo que pode ser observado na Tabela 2, a distribuição de temperatura média nos ensaios sem a presença de usuários está acima daquelas implementadas no sistema de controle do difusor, mesmo nas regiões mais frias. Isso ocorre porque, estando o sensor posicionado na parte mais baixa e de ar mais frio da cabine, indica ao difusor que há necessidade de maior produção de vapor. O vapor, produzido em maior quantidade, acumula no topo e aumenta expressivamente a temperatura média no ambiente. Observou-se também que os pontos de aquecimento mais lento foram localizados nas regiões mais baixas da geometria, próximas as portas de entrada e saída da cabine, provavelmente por não terem sido totalmente vedadas.

Desta forma, a temperatura do meio aquecido pode ser considerada constante em toda a região de estudo e aplicada como condição de contorno na resolução das equações diferenciais de transferência de calor do modelo.

Nas Figuras 10, 11 e 12, a seguir, são observados os gráficos de distribuição de temperaturas por posição para cada temperatura inicial (T_i) estudada. Estas posições podem ser acompanhadas na Figura 3, que ilustra a malha dos sensores.



Figura 10. Faixas da distribuição de temperaturas por posições (T_i = 40°C).



Figura 11. Faixas da distribuição de temperaturas por posições (T_i = 45°C).

Figura 12. Faixas da distribuição de temperaturas por posições (T_i = 50°C).



Verificou-se que, dentre os três ensaios, o que apresentou melhor conforto térmico ao usuário foi aquele cujo T_i = 45°C. Este ensaio também garantiu, conforme a Tabela 2, temperatura média mínima e temperatura média da posição mais fria necessárias à deterioração do vírus, uma vez que, de acordo com Lewith (1890) e Baker (1933; 1934), a esterilização requer temperatura mínima de 50°C em exposição ao vapor aquecido.

4.1.2. Regime transiente

Foi avaliado também a presença de distúrbios na distribuição da temperatura no interior da cabine de esterilização a vapor. Com a temperatura do ensaio estabelecida, avaliou-se o desempenho do sistema de controle com a entrada e saída de usuários ao longo do tempo. A Tabela 3 apresenta um resumo dos resultados obtidos nos três ensaios de distribuição de temperaturas no interior da cabine. Esses dados correspondem aos diferentes valores do parâmetro implementado no sistema de controle do difusor, que são, respectivamente, 40°C, 45°C e 50°C, com entrada e saída de usuários a cada 3 minutos com permanência média de 30 segundos.

Parâmetro	40°C	45°C	50°C
Temperatura média (°C)	49,97	52,92	63,85
Desvio padrão entre médias (°C)	5,06	2,90	5,02
Ponto de aquecimento mais lento	Fundo	Fundo	Fundo
Temperatura média da posição mais fria (°C)	40,07	46,68	53,86

Tabela 3. Resultados da distribuição de temperaturas para diferentes temperaturas de alimentação do vapor com entrada e saída de usuários.

Na Tabela 3, verificou-se que a distribuição de temperaturas nos ensaios ainda apresenta média acima das temperaturas implementadas no sistema de controle do difusor, mesmo as regiões de temperatura média mais fria. Porém, por causa da abertura das portas, parte do vapor escapou da cabine levando à pequena alteração da distribuição da temperatura. Dentre os ensaios realizados, o segundo apresentou maior diferença entre os respectivos regimes estacionário e transiente.

A Figura 13 apresenta a média das temperaturas pelo tempo, em minutos, com entrada e saída de usuários. Nela foi possível observar que as temperaturas flutuaram em torno da média obtida para cada ensaio.



Figura 13. Médias das temperaturas (°C) pelo tempo (min) em estado transiente.

Observou-se ainda que, para o ensaio com temperatura inicial de 50°C, o sistema de controle do equipamento não recuperou a temperatura média de distribuição. Esse fato ocorreu, provavelmente, pela massa de vapor perdida para a vizinhança; e, também, pelo tempo necessário para compensar tal efeito exceder o tempo médio para novo distúrbio realizado.

Já para temperatura inicial de 45°C, o tempo de recuperação da temperatura média no interior da cabine é inferior a 2 minutos. Este ensaio também apresenta temperaturas do ambiente interno permanentemente acima de 50°C, o que satisfaz à exigência de Lewith (1890) e Baker (1933; 1934) quanto à esterilização.

4.2. MODELAMENTO MATEMÁTICO

4.2.1. Linhas de fluxo

Nas Figuras 14 e 15, os comportamentos das linhas de fluxo no interior da cabine estão representando as diferentes velocidades médias de alimentação do vapor, respectivamente 45 m/s e 60 m/s. Estes resultados ilustram claramente o comportamento complexo do escoamento das partículas. É possível observar, então, que, com o aumento da velocidade, o perfil de escoamento do vapor se comporta de forma mais uniforme ao longo da geometria. Isto porque a maior velocidade do fluido no interior da mangueira pode gerar mais homogeneidade na vazão do vapor, vencendo a grande perda de carga oriunda da forma sanfonada da tubulação.



Figura 14. Linhas de fluxo para velocidade de entrada de 45 m/s.

(a) Vista 3D da cabine, (b) Vista frontal, (c) vista lateral.



Figura 15. Linhas de fluxo para velocidade de entrada de 60 m/s.

(a) Vista 3D da cabine, (b) Vista frontal, (c) vista lateral.

A velocidade média de deslocamento das gotículas de água líquida também foi maior, cerca de 25%, com o aumento da velocidade do vapor. Esta diferença resulta em menos tempo para atingir o estado estacionário com temperatura constante e pressões mais elevadas no interior na cabine.

Ao se comparar estas figuras, observou-se também que o comportamento das linhas de fluxo desenvolveram movimento em forma de espiral. Este perfil é mais desenvolvido no topo da geometria devido à densidade do vapor ser menor do que a densidade do ar em temperatura ambiente, levando a apresentar pressões e temperaturas mais elevadas nessas regiões. Este fato foi observado com auxílio dos dados experimentais, nos quais foi visto que as regiões mais frias e que levaram mais tempo de aquecimento tenha sido no fundo da cabine, próximo ao piso.

4.2.2. Pressão e temperatura do fluido no esterilizador a vapor

A temperatura média do fluido, simulada e medida de todos os doze sensores digitais de temperatura, pode ser vista na Figura 16. A temperatura do fluido simulada está de acordo com a temperatura do fluido medida.

Figura 16. Temperatura média do fluido medida e simulada para (a) ensaios a 40°C, (b) ensaios a 45°C e (c) ensaios a 50°C.



(a) Temperatura média do fluido medida e simulada para temperatura de 40°C.



(b) Temperatura média do fluido medida e simulada para temperatura de 45°C.



(c) Temperatura média do fluido medida e simulada para temperatura de 50°C.

Esses desvios entre as temperaturas de fluido medidas e simuladas podem ser explicadas com a inicialização de temperatura constante da simulação CFD, como também as hipóteses de alimentação adotadas. Devido ao fato de que a principal inativação do microrganismo ocorre principalmente em temperaturas mais altas, esses pequenos desvios em temperaturas baixas podem ser desprezados. O modelo CFD desenvolvido foi capaz de prever a temperatura do fluido no esterilizador a vapor ao longo de toda a fase de esterilização.

A Figura 17 mostra o erro médio entre as temperaturas do fluido simuladas e as medidas, para todos os doze sensores digitais de temperatura. Pode-se observar que a temperatura medida e a simulada estão em muito boa concordância, devido ao fato do erro médio ser inferior a 0,5%, o que está abaixo da precisão do sensor de temperatura. O erro máximo entre os parâmetros é inferior a 2%. A definição do erro é mostrada na Eq. 12:

$$Erro = 1 - \frac{T_{medido}}{T_{simulado}}$$
(12)

Figura 17. Erros médios entre a simulação CFD e as medições de todos os doze sensores digitais de temperatura.



Após a validação da temperatura do fluido simulado, a distribuição da temperatura dentro do bioesterilizador foi investigada usando CFD. Com isso, representações de volume da temperatura do fluido dentro da cabine foram mostradas na Figura 18 para diferentes temperaturas de implementação no sistema de controle da cabine de esterilização.

A Figura 18 mostra a temperatura do vapor após atingir o estado estacionário do sistema. As temperaturas médias simuladas são validadas com as temperaturas médias obtidas experimentalmente (ver Tab. 2). As diferenças máximas de temperatura detectadas neste momento são 2 K. Como era de se esperar, a diferença de temperatura se mantém constante à medida que o processo continua. Esses resultados indicam que a distribuição da temperatura dentro do bioesterilizador é homogênea.



Figura 18. Renderização de volume da temperatura do vapor no bioesterilizador.

(a) Temperatura de 40°C, (b) temperatura de 45°C e (c) temperatura de 50°C.

Uma representação do volume para pressão do fluido dentro do esterilizador também foi feito e é representado na Figura 19 a seguir.



Figura 19. Renderização de volume da pressão do vapor no bioesterilizador.

(a) Temperatura de 40°C, (b) temperatura de 45°C e (c) temperatura de 50°C.

Como observado, a pressão média no interior da cabine de esterilização é de 2,0 * 10⁵ Pascal, equivalente a aproximadamente 2 atm. Era de se esperar este valor, uma vez que a literatura indica que a fase de esterilização ocorre dentro da faixa de 2

a 3 atm (FEURHUBER et al, 2019). Para melhor visualização das Figuras 19 e 20, as mesmas estão presentes nos Anexos 4 e 5 em tamanho maior.

Conclui-se, assim, que a aplicação deste modelo (1) permite prever a temperatura do fluido e seus gradientes ao longo da geometria; e (2) permite avaliar a produção e a qualidade do vapor, bem como (3) analisar a distribuição de vapor no mesmo.

5. CONCLUSÃO

Pelos resultados apresentados neste trabalho foi possível concluir que:

- Desenvolver a arquitetura do sistema de esterilização a vapor;
 - O BioEsterizador é composto por uma estrutura metálica de alumínio coberto com plástico tipo lona transparente vinil de PVC. Possui uma área coberta de 5 m², com 3,0 metros de comprimento e piso formado por peças modulares de plásticos antiderrapantes que atendem as normas da ANVISA, as quais se encontram encaixadas uma a outra de (50 cm x 50 cm x 5 cm de altura).
- Aferir, via sensores digitais de temperatura, o comportamento em estado estacionário e transiente do sistema;
 - A distribuição de temperatura média no interior da cabine nos ensaios sem a presença de usuários está acima daquelas implementadas no sistema de controle do difusor, mesmo nas regiões mais frias. Isso ocorre porque, estando o sensor posicionado na parte mais baixa e de ar mais frio da cabine, indica ao difusor que há necessidade de maior produção de vapor.
 - Verificou-se que a distribuição de temperaturas nos ensaios com distúrbios ainda apresenta média acima das temperaturas implementadas no sistema de controle da temperatura interna da cabine, mesmo as regiões de temperatura média mais fria. Porém, por causa da abertura das portas, parte do vapor escapou da cabine levando à pequena alteração da distribuição da temperatura.
 - Para temperatura interna controlada em 45°C, o tempo de recuperação da temperatura média no interior da cabine é inferior a 2 minutos. Este ensaio também apresenta temperaturas do ambiente interno permanentemente acima de 50°C.

- Validar os gradientes simulados de temperatura por comparação com os dados obtidos experimentalmente;
 - As diferenças máximas de temperatura detectadas neste momento são 2 K.
 Como era de se esperar, a diferença de temperatura se mantém constante à medida que o processo continua. Esses resultados indicam que a distribuição da temperatura dentro do bioesterilizador é homogênea.
 - Como observado, a pressão média no interior da cabine de esterilização é de 2,0 * 10⁵ Pascal, equivalente a aproximadamente 2 atm. Era de se esperar este valor, uma vez que a literatura indica que a fase de esterilização ocorre dentro da faixa de 2 a 3 atm (FEURHUBER et al, 2019).
- Determinar o perfil de velocidade, os gradientes de pressão e a distribuição do vapor no interior da cabine de esterilização.
 - A velocidade média de deslocamento das gotículas de água líquida também foi maior, cerca de 25%, com o aumento da velocidade do vapor. Esta diferença resulta em menos tempo para atingir o estado estacionário com temperatura constante e pressões mais elevadas no interior na cabine. Ao se comparar as linhas de fluxo, observou-se também que o comportamento desenvolveu movimento em forma de espiral.
 - A temperatura do fluido simulada está de acordo com a temperatura do fluido medida. Pode-se observar que a temperatura medida e a simulada estão em muito boa concordância, devido ao fato do erro médio ser inferior a 0,5%, o que está abaixo da precisão do sensor de temperatura. O erro máximo entre os parâmetros é inferior a 2%.

6. TRABALHOS FUTUROS

As sugestões para os estudos futuros visam investigar outras condições importantes de operação do processo de esterilização a vapor além da aceitação do produto no mercado hospitalar.

- Avaliar diferentes tamanhos para cabine de esterilização e como a geometria influência os parâmetros aqui avaliados;
- Determinar o tempo necessário para o usuário permanecer no interior da cabine para efeito de esterilização;
- Possível aplicação de métodos de automação para aperfeiçoar controle da temperatura no interior da cabine;
- Validação dos dados experimentais de inativação microbiana utilizando de microrganismos de referência, como *Escherichia Coli*;
- Acompanhamento da utilização das cabines implementadas nos hospitais como performance e aceitação dos funcionários ao procedimento proposto;
- Desenvolver um balanço de custos para construção e implementação de novas unidades, bem analisar economicamente o processo proposto.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICA

Aslund, P. E., Hägglund, R., Carlsson, L. A., & Isaksson, P. (2014). Modelling of global and local buckling of corrugated board panels loaded in edge-to-edge compression. Journal of Sandwich Structures and Materials, 16(3), 272-292.

ANSYS Fluent Theory Guide, 2016

Berry, T. M., Fadiji, T. S., Defraeye, T., & Opara, U. L. (2017). The role of horticultural carton vent hole design on cooling efficiency and compression strength: A multi-parameter approach. Postharvest Biology and Technology, 124, 62-74.

Biancolini, M. E., & Brutti, C. (2003). Numerical and experimental investigation of the strength of corrugated board packages. Packaging Technology and Science, 16(2), 7-60.

Chick, H., and Martins, C. J. *apud* Perkins, J. Principles and methods of sterilization in health sciences 5^ª ed. Illinois, Charles C. Thomas, 1969, p. 66.

Cook, R., Malkus, D., Plesha, M., & Witt, R. (2002). Concepts and applications of finite element analysis (4th ed.). New York: Wiley.

Courant, R. (1943). Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. Bulletin of the American Mathematical Society, 9(1), 1-23.

Delele, M. A., Verboven, P., Ho, Q. T., & Nicolaï, B. M. (2010). Advances in mathematical modelling of postharvest refrigeration processes. Stewart Postharvest Review, 6(2), 1-8.

Fadiji, T., Berry, T., Coetzee, C. J., & Opara, L. (2017). Investigating the mechanical properties of paperboard packaging material for handling fresh produce under different environmental conditions: Experimental analysis and finite element modelling. Journal of Applied Packaging Research, 9(2), 20-34.

Flitter, An introduction to physics in nursing Saint Jonis, Mosby, 1962.

Frobisher, M. Microbiologia médica 3ª ed. Barcelona, Salvat, 1964.

G. Caruso, D. Vitale Di Maio, A. Naviglio, Condensation heat transfer coefficient with noncondensable gases inside near horizontal tubes, Desalination 309 (Supplement C) (2013) 247–253, https://doi.org/10.1016/j.desal.2012.10.026 http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916412005838.

G. Zschaeck, T. Frank, A.D. Burns, CFD modelling and validation of wall condensation in the presence of non-condensable gases, Nucl. Eng. Des. 279 (2014) 137–146, https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2014.03.007 http://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0029549314001393.

Huebner, K.H., Dewhirst, D. L., Smith, D. E., & Byrom, T. G. (2001). The finite element method for engineers. New York: John Wiley & Sons.

Hughes, T. J. (2012). The finite element method: Linear static and dynamic finite element analysis. Courier Corporation.

Hutton, D. (2004). Fundamentals of finite element analysis. McGrawHill.

Incropera, F., Bergman, T. and DeWitt, D., 2008. *Fundamentos De Transferência De Calor E De Massa*. Rio de Janeiro: LTC.

Jhu. 2020. COVID-19 Map - Johns Hopkins Coronavirus Resource Center. Center for Systems Science and Engineering (CSSE) at Johns Hopkins University (JHU). Available to: <u>https://coronavirus.jhu.edu/map.html</u>.

L. Prabu S, S. TNK, R. K, and T. R, "Concepts of Process Validation in Solid Dosage Form [Tablet] – An Overview," Sch. J. Pharm. Pharmacol., vol. 1, no. 1, pp. 1–12, 2014.

Lewith, S. apud Perkins, J. Principles and methods of sterilization in health sciences 5^a ed. Illinois, Charles C. Thomas, 1969, p. 286-287.

M. Feurhuber, A. Cattide, M. Magno, M. Miranda, R. Prieler, C. Hochenauer, Prediction of the fluid flow, heat transfer and inactivation of microorganism at medical devices in modern steam sterilizers using computational fluid dynamics, Appl. Therm. Eng. 127 (2017) 1391–1403, https://doi.org/10.1016/j. applthermaleng.2017.08.085 http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S1359431117330739.

M. Hofacre, "Moist Heat Sterilizer Systems: Design, Commissioning, Operation, Qualification and Maintenance," PDA, no. 8, p. 70, 2010.

Mattos, L. U. Princípios de física e química aplicados à enfermagem. Rio de Janeiro, ABEn, 1970.

Moaveni, S. (2008). Finite element analysis theory and application with ANSYS, 3/e. India: Pearson Education.

Moore, W. J. Físico-química. Rio de Janeiro, ao Leitor Técnico e Ed. da USP, 1968.

Norton, T., & Sun, D. W. (2006). Computational fluid dynamics (CFD) ean effective and efficient design and analysis tool for the food industry: A review. Trends in Food Science & Technology, 17(11), 600-620.

Opara, U. L., & Pathare, P. B. (2014). Bruise damage measurement and analysis of fresh horticultural produced a review. Postharvest Biology and Technology, 91, 9-24.

Peeri N. C., Shrestha N., Rahman M. S., Zaki R., Tan Z., Bibi S., Baghbanzadeh M., Aghamohammadi N., Zhang W., Haque U. 2020. The SARS, MERS and novel Coronavirus (COVID-19) epidemics, the newest and biggest global health threats: what lessons have we learned? Int. J. Epidemiol. (2020):1-10. doi: 10.1093/ije/dyaa033.

Perkins, J. Principles and methods of sterilization in health sciences 5^ª ed. Illinois, Charles C. Thomas, 1969.

Pommier, J. C., Poustis, J., Fourcade, E., & Morlier, P. (1991). Determination of the critical load of a corrugated box subjected to vertical compression by finite element methods. In Proceedings of the 1991 International Paper Physics Conference, Kona, HI (pp. 37-447).

Rao, S. S. (2010). The finite element method in engineering. Elsevier.

Reddy, J. N. (2014). An introduction to nonlinear finite element analysis: With applications to heat transfer, fluid mechanics, and solid mechanics. OUP Oxford.

Segerlind, L. J. Applied Finite Element Analysis. Second Edition. John Willey and Sons, 1984. 427p.

Schaldach, G., Berger, L., Razilov, I., & Berndt, H. (2000). Computer simulation for fundamental studies and optimisation of ICP spray chambers. Berlin, Germany: ISAS (Institute of Spectrochemistry and Applied Spectroscopy) Current Research Reports.

T.H. Shih, W.W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, J. Zhu, A new k-ε eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows, Comput. Fluid 24 (3) (1995) 227–238, https://doi.org/10.1016/0045-7930(94)00032-T http://www.sciencedirect.com/ science/article/pii/004579309400032T.

USDHHS, FDA, CDER, CBER, C. V. M., "Guidance for Industry Process Validation : General Principles and Practices," Quality, p. 22, 2011.

W. Lee, A pressure iteration scheme for two-phase flow modeling, in: T.N. Veziroglu (Ed.), Multiphase Transport Fundamentals, Reactor Safety, Applications, Hemisphere Publishing, Washington, DC, (1980) https://www.researchgate. net/publication/291211634.

Wang X. W., Li J. S., Guo T. K., Zhen B., Kong Q. X., Yi B., Li Z., Song N., Jin M., Xiao W. G., Zhu X. M., Gu C. Q., Yin J., Wei W., Yao W., Liu C., Li J. F., Ou G.R., Wang M. N., Fang T. Y., Wang G. J., Qiu Y. H., Wu H. H., Chao F. H., Li, J. W. 2005a. Concentration and detection of SARS Coronavirus in sewage from Xiao Tang Shan hospital and the 309th Hospital of the Chinese People's Liberation Army. Water Sci. Technol. (2005); 52(8): 213 – 221. doi:10.2166/wst.2005.0266.

Wyss, O *apud* Perkins, J. *Principles and methods of sterilization in healt sciences*. 5^a ed. Illinois, Charles C. Thomas, 1969, p. 74.

Xia, B., & Sun, D. W. (2002). Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the food industry: A review. Computers and Electronics in Agriculture, 34(1), 5-24.

ANEXOS

Anexo 1. Propriedades do material para a simulação CFD.

Vapor (fase gasosa)		
Densidade (kg/m ³)	Gás ideal	
Calor específico (W/kg.K)	Polinomial por partes	
Condutividade térmica (W/m.K)	0,0242	
Viscosidade (kg/ms)	1,7894 * 10 ⁻⁵	

Água (fase líquida)		
Densidade (kg/m ³)	Polinomial por partes	
Calor específico (W/kg.K)	4246,7	
Condutividade térmica (W/m.K)	0,6	
Viscosidade (kg/ms)	0,001003	

Alumínio (estrutura)	
Densidade (kg/m ³)	2700
Calor específico (W/kg.K)	897
Condutividade térmica (W/m.K)	236

Plástico (paredes)	
Densidade (kg/m³)	1550
Calor específico (W/kg.K)	1600
Condutividade térmica (W/m.K)	0,2

Fonte: VDI-Wärmeatlas, 2013.

Anexo 2. Malha numérica fina não-estruturada espacialmente resolvido.



0,000

0,500

(0)

2,000 (m)

1,500

Anexo 3. Vista 3D do perfil de velocidade para velocidade inicial de 45 e 60 m/s.







Anexo 5. Renderização de volume da pressão do fluido no esterilizador a vapor.

