

Eduardo José de Araujo

**Modelo Computacional para Otimização de um
Sistema de Tratamento de Líquidos por
Aplicação de Pulsos de Alta Tensão**

Belo Horizonte

Junho, 2019

Eduardo José de Araujo

Modelo Computacional para Otimização de um Sistema de Tratamento de Líquidos por Aplicação de Pulsos de Alta Tensão

Tese de Doutorado submetida à Banca Examinadora designada pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito para obtenção do Título de Doutor em Engenharia Elétrica
Área de concentração: Compatibilidade Eletromagnética e Qualidade de Energia

Universidade Federal de Minas Gerais

Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica

Orientador: Prof. Ivan José da Silva Lopes

Coorientador: Prof. Jaime Arturo Ramírez

Belo Horizonte

Junho, 2019

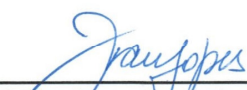
**"Modelo Computacional Para Otimização de Um Sistema de
Tratamento de Líquidos Por Aplicação de Pulsos de Alta
Tensão"**

Eduardo Jose de Araujo

Tese de Doutorado submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito para obtenção do grau de Doutor em Engenharia Elétrica.

Aprovada em 14 de junho de 2019.

Por:



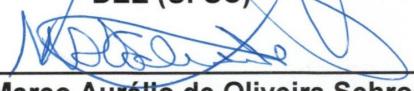
Prof. Dr. Ivan José da Silva Lopes
DEE (UFMG) - Orientador



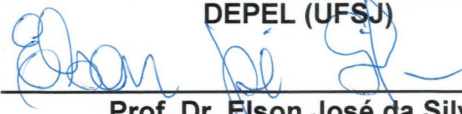
Prof. Dr. Jaime Arturo Ramirez
DEE (UFMG) - Co-orientador



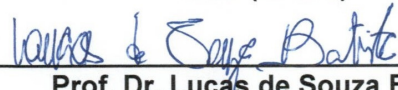
Prof. Dr. Adroaldo Raizer
DEE (UFSC)



Prof. Dr. Marco Aurélio de Oliveira Schroeder
DEPEL (UFSJ)



Prof. Dr. Elson José da Silva
DEE (UFMG)



Prof. Dr. Lucas de Souza Batista
DEE (UFMG)

Araujo, Eduardo Jose de

Modelo Computacional para Otimização de um Sistema de Tratamento de Líquidos por Aplicação de Pulsos de Alta Tensão [manuscrito] / Eduardo Jose de Araujo. - 2019.

131 f., enc.: il.

Orientador: Ivan Jose da Silva Lopes.

Co-orientador: Jaime Arturo Ramírez.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia.

1.Alta Tensão. 2.Otimização. 3.Elementos Finitos. 4.Tratamento de líquidos. I.Lopes, Ivan Jose da Silva . II.Ramírez, Jaime Arturo . III.Universidade Federal de Minas Gerais. Escola de Engenharia. IV.Título.

Dedico este trabalho à minha filha Isabella, meu pai Lery (*in memorian*), minha mãe Rute e à minha primeira esposa Rosana (*in memorian*).

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por iluminar meu caminho nesta trajetória.

Meus sinceros agradecimentos ao meu orientador Prof. Dr. Ivan José da Silva Lopes pela paciência durante meus momentos de aflição, pelas orientações técnicas, pelas palavras de incentivo e pelo senso de organização e planejamento que foram extremamente importantes para o cumprimento das etapas deste trabalho. Ao Prof. Dr. Jaime Arturo Ramirez pelas orientações, profissionalismo e paciência durante os momentos difíceis deste trabalho. Aos colegas de laboratório pelo suporte, pelas contribuições com as discussões sobre o trabalho e pelo incentivo.

À minha filha Isabella pela compreensão, principalmente durante os finais de semana que deixei as brincadeiras com ela para dedicar aos estudos. Apesar de ser uma criança, compreendeu o esforço em prol dela.

Ao meu pai Lery (*in memorian*), minha fonte de inspiração, pela dedicação para manter meus estudos. Minha irmã Rogéria e família pelo apoio em momentos difíceis. À minha mãe Rute pelos sacrifícios em prol dos meus estudos. À minha primeira esposa Rosana (*in memorian*) pelo exemplo que deixou de perseverança e que procurei seguir durante esta caminhada.

Ao meu padrinho Geraldo e minha madrinha Geralda (*in memorian*) que sempre incentivaram meus estudos. Às minhas primas Dirce e Sãozinha que sempre estiverem ao meu lado.

À minha namorada Iride por valorizar minha dedicação a este trabalho.

Aos professores Lucas, Patricia e Silvana da UNA pelo apoio.

Agradeço também às instituições CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) e CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Tecnológico) pelo suporte financeiro ao trabalho.

Meus agradecimentos de uma forma geral a todos que de alguma forma contribuíram para este trabalho.

Resumo

A busca por produtos alimentícios saudáveis tem se tornado cada vez mais frequente devido à conscientização dos consumidores em relação aos benefícios para a saúde. No método de tratamento de produtos líquidos convencional por pasteurização, a eliminação de microrganismos patogênicos por meio da aplicação de temperaturas elevadas durante um determinado tempo, porém o tratamento térmico pode produzir efeitos indesejáveis no líquido, alterando suas características nutricionais e sensoriais. O método de aplicação de pulsos elétricos (PEF) para tratamento de líquidos é uma tecnologia emergente e promissora com potencial de aplicação na indústria de sucos, leites e outras bebidas. Em relação aos processos térmicos convencionais, a minimização dos efeitos do calor no líquido em tratamento é o principal atrativo desta tecnologia.

A inativação microbiana mensura a eficiência do tratamento do ponto de vista microbiológico. A densidade de energia é outro parâmetro de interesse, já que está relacionada com o custo operacional do processo. A inativação microbiana e a densidade de energia de um tratamento por aplicação de pulsos elétricos são dependentes da distribuição de campo elétrico e do tempo de tratamento. Considerando que a inativação microbiana e a densidade de energia possuem comportamentos conflitantes em relação a estes parâmetros, configura-se um problema de otimização multiobjetivo.

Dentro deste contexto, este trabalho visa apresentar uma metodologia computacional para gerar soluções ótimas aproximadas em relação à inativação microbiana e densidade de energia para sistemas PEF. Inicialmente, é apresentado um modelo computacional preliminar para câmaras de tratamento estáticas, sem considerar a análise térmica. Este modelo é baseado num algoritmo de elementos finitos em MatLab^{MR} para geração da distribuição de campo elétrico, o qual é acoplado com algoritmo de otimização multiobjetivo NSGA-II para geração de um conjunto de soluções para diferentes arranjos de eletrodos (coaxial, planos-paralelos e cilíndricos). A análise é feita para um líquido genérico de condutividade de 0.2S/m contendo uma distribuição homogênea da bactéria *E. coli*. Os resultados mostram um melhor conjunto de soluções para a câmara de tratamento coaxial em relação aos demais arranjos. Diante dos melhores resultados obtidos para a câmara de tratamento coaxial, a mesma foi selecionada para utilização em sistemas dinâmicos, após adequações dimensionais.

Após estudos iniciais, um modelo dinâmico é apresentado, o qual acopla a distribuição de campo elétrico, temperatura e escoamento do fluido através do software COMSOL^{MR}, integrado com algoritmo de otimização multiobjetivo NSGA-II. As simulações foram executadas no COMSOL^{MR} para um planejamento experimental computacional considerando a tensão aplicada e o raio do eletrodo interno da geometria coaxial como variáveis. O limite superior da faixa de tensão aplicada e a faixa do raio do eletrodo interno foram especificados

para limitação do campo elétrico no líquido em $50kV/cm$, de forma a evitar disrupções dentro no líquido em tratamento. Após regressão dos resultados de campo elétrico médio obtidos do planejamento experimental computacional realizado, a expressão de campo elétrico gerada para a geometria coaxial foi considerada nas funções objetivo (inativação microbiana e densidade de energia) do problema de otimização multiobjetivo. Através da análise térmica, foi possível limitar o número de pulsos aplicados e, consequentemente, o tempo de tratamento, considerando o limite superior de temperatura do líquido em $45^{\circ}C$. As frequências dos pulsos aplicados foram definidas para cada tipo de suco analisado. O tempo de trânsito do líquido dentro da câmara de tratamento foi ajustado com a frequência dos pulsos para um escoamento laminar. A análise de uniformidade do campo elétrico dentro do líquido, a qual é relevante para garantir uma boa uniformidade do tratamento, foi realizada com base no cálculo do coeficiente de variação dos valores gerados na malha de elemento finitos.

A metodologia foi aplicada para quatro estudos de caso, considerando diferentes tipos de microrganismos (*E. coli* e *S. aureus*), diferentes tipos de sucos (uva e laranja), sistemas com múltiplos estágios e diferentes modelos de predição de inativação microbiana (*Weibull* e *Hulsheger*). Através das curvas Pareto geradas pelo modelo computacional, foi possível analisar as soluções geradas em termos de inativação microbiana e densidade de energia, correlacionando com as variáveis consideradas. Por exemplo, para a bactéria *E. coli* em suco de uva, os resultados mostram uma taxa de inativação microbiana de aproximadamente -2.2 (escala $\log_{10}$) para densidade de energia de aproximadamente $115kJ/kg$. Utilizando sistemas com múltiplos estágios, é possível obter inativação microbiana de -3.1 com densidade de energia de aproximadamente $90kJ/kg$, selecionando pontos específicos nas curvas Pareto para cada estágio. O modelo computacional apresentado possibilita, com base na análise das curvas Pareto geradas, a seleção de pontos ótimos em função dos requisitos de um processo, em relação à inativação microbiana e eficiência energética, agregando flexibilidade e dinamismo aos projetos de câmaras de tratamento para a tecnologia.

Abstract

The search for healthy food products has become more frequent due to consumer awareness of health benefits. In the conventional liquid pasteurization treatment method, the elimination of pathogenic microorganisms is carried out by applying high temperatures for a certain time, but it may produce undesirable effects in the liquid, changing its nutritional and sensorial characteristics. The PEF method for treatment of liquids is an emerging and promising technology with potential application in the industry of juice, milk and other beverages. In comparison with the thermal process, the minimizing of the heat effects on the liquid under treatment is the main attraction of this technology.

The microbial inactivation measures the treatment efficiency from a microbiological point of view. The energy density is another parameter of interest, since it is related to the operational cost of the process. The microbial inactivation and energy density of a treatment by electric pulses are dependent on the electric field distribution and treatment time. Considering that the microbial inactivation and energy density have conflicting behaviors in relation to these parameters, a problem of multiobjective optimization is configured.

Within this context, this work aims to present a computational methodology to generate solutions in relation to microbial inactivation and energy density for PEF systems. Initially, is presented a preliminary computational model for static treatment chambers, not considering thermal analysis. This model is based on a finite element algorithm in MatLab^{RM} for generating the electric field distribution, which is coupled with NSGA-II multiobjective optimization algorithm to generate Pareto curves for different electrode arrangements (coaxial, plate-parallel and cylindrical). The analysis is done for a generic liquid of conductivity of $2mS/cm$ containing a homogeneous distribution of bacteria *E. coli*. The results showed a better set of solutions for the coaxial treatment chamber in relation to the other arrangements. Considering the best results obtained for the coaxial treatment chamber, it was selected for use in dynamic systems, after dimensional adjustments.

After preliminary studies, a dynamic model is presented, which couples the electric field distribution, temperature and fluid flow using the COMSOL^{RM} software, integrated with NSGA-II multiobjective optimization algorithm. The simulations in the COMSOL^{RM} were performed for experimental computational design considering as variables the applied voltage and the internal electrode radius of the coaxial geometry. The upper limit of the applied voltage range and the radius range of the internal electrode were specified to limit the electric field in the liquid at $50kV/cm$, in order to avoid disruptions within the liquid under treatment. After regression of the results of average electric field obtained from a computational design of experiment, the electric field expression generated for the coaxial geometry was considered in the objective functions (microbial inactivation and energy density) of the multiobjective optimization problem. Based on the thermal analysis, it was

possible to limit the number of pulses applied and, consequently, the treatment time, considering the upper limit of liquid temperature at 45 °C. The frequencies of the applied pulses were defined for each type of juice analyzed. The transit time of the liquid within the treatment chamber was synchronized with the frequency of the pulses for a laminar flow. The analysis of uniformity of the electric field within the liquid, which is relevant to ensure a good uniformity of the treatment, was based on the coefficient of variation obtained from the electric field values in the mesh elements.

The methodology was applied to four case studies, considering different types of microorganisms (*E. coli* and *S. aureus*), different types of juice (grape and orange), multiple treatment stages and different prediction models of microbial inactivation (*Weibull* and *Hulshager*). Based on the Pareto curves generated by the computational model, it was possible to analyze the solutions generated in terms of microbial inactivation and energy density, correlating with the variables under study. For example, for the bacterium *E. coli* in grape juice, the results showed a microbial inactivation of about -2.2 (escala $\log_{10}$) for energy density of approximately 115kJ/kg . Using multiple stages, it is possible to obtain a inactivation of -3.1 with energy density of about 90kJ/kg , selecting specific points on the Pareto curves for each stage. Based on the analysis of the generated Pareto curves, the computational model allows the selection of solutions as a function of the requirements of a process, in relation to microbial inactivation and energy efficiency, adding flexibility and dynamism to the design of treatment chambers.

Lista de ilustrações

Figura 2.1 – Publicações científicas sobre o tema PEF em processamento de alimentos líquidos nas últimas duas décadas (Fonte: Science Direct)	8
Figura 2.2 – Diagrama esquemático de um sistema de tratamento de líquidos por pulsos de alta tensão	8
Figura 2.3 – Tensão induzida na membrana celular pela aplicação de campo elétrico externo	10
Figura 2.4 – Comparativos de inativação microbiana para diferentes formas de onda	11
Figura 2.5 – Circuito elétrico equivalente de um sistema de tratamento por PEF . .	13
Figura 2.6 – Estruturas de membranas das bactérias tipo gram-positivo e gram-negativo - adaptado de (PAGAN; MAÑAS, 2006)	14
Figura 2.7 – Geometrias típicas para bactérias <i>E. coli</i> e <i>S. aureus</i> - adaptado de (QIN et al., 1998)	15
Figura 2.8 – Configurações típicas de câmaras de tratamento	17
Figura 2.9 – Seção transversal da câmara de tratamento apresentada em (ALKHAFAJI; FARID, 2007)	17
Figura 2.10–Câmara de tratamento utilizada nos experimentos reportados em (GAD; JAYARAM, 2015) - a) Vista do esquemático em corte b) Visão superior da câmara de tratamento	18
Figura 2.11–Distribuição de campo elétrico dentro da câmara de tratamento com eletrodos na configuração colinear	20
Figura 3.1 – Modelo geral de um processo	28
Figura 3.2 – Fluxograma geral de um planejamento experimental	29
Figura 3.3 – Mapeamento dos parâmetros no espaço dos objetivos (Fonte: próprio autor)	35
Figura 3.4 – Curva de Pareto para problema de minimização de duas funções	36
Figura 3.5 – Ordenação por dominância	37
Figura 3.6 – Fluxograma geral do NSGA-II	39
Figura 4.1 – Fluxograma do modelo computacional para sistemas estáticos	43
Figura 4.2 – Dimensional e condições de contorno de câmaras de tratamento estáticas	43
Figura 4.3 – Fluxograma do modelo computacional para sistema dinâmico	48
Figura 4.4 – Seção transversal da câmara de tratamento com arranjo de eletrodos coaxial	49
Figura 4.5 – Malha de Elementos Finitos 3D gerada pelo COMSOL ^{MR} para a geometria coaxial: a) Malha 1 (menor refinamento) b) Malha 5 (configuração default)	49
Figura 4.6 – Tempo de simulação em função do número de elementos da malha (1 a 9)	50

Figura 4.7 – Pulso de tensão aplicado nos eletrodos	53
Figura 4.8 – Densidade de corrente para fluido modelado por R e por RC	53
Figura 4.9 – Condições de contorno de potenciais elétricos para a geometria coaxial	54
Figura 4.10–Condições de contorno para modelo térmico e transferência de calor do eletrodo externo para ambiente	56
Figura 4.11–Condições de contorno para dinâmica de escoamento do fluido	58
Figura 4.12–Inativação microbiana em função do campo elétrico aplicado 10 a 20kV/cm e tempo de tratamento 200 a 300us	63
Figura 4.13–Densidade de energia xem função do campo elétrico aplicado 10 a 20kV/cm e tempo de tratamento 200 a 300us	64
Figura 5.1 – Geometrias de eletrodos aplicadas às simulações computacionais com câmaras estáticas	68
Figura 5.2 – Distribuição de campo elétrico na região central- eletrodos cilíndricos	70
Figura 5.3 – Distribuição de campo elétrico na região central - arranjo coaxial	70
Figura 5.4 – Distribuição de campo elétrico na região central - eletrodos planos paralelos	71
Figura 5.5 – Comparativo entre curvas Pareto estimadas para diferentes arranjos de eletrodos (sistema estático)	73
Figura 5.6 – Comparativo entre magnitudes do campo elétrico obtidas através do algoritmo implementado em MatLab ^{MR} e pelo COMSOL ^{MR}	74
Figura 5.7 – Cortes no plano xy da distribuição de potenciais na câmara de trata- mento para $V = 24kV$ e $r_i = 1cm$	75
Figura 5.8 – Visão 3D da distribuição de campo elétrico para $V = 24kV$ e $r_i = 1cm$	76
Figura 5.9 – Coeficiente de variação e valor médio ponderado do campo elétrico como função do raio do eletrodo interno para uma tensão aplicada de 24kV	76
Figura 5.10–Gráficos 3D: a) Distribuição de velocidade; b) Distribuição de pressão	77
Figura 5.11–Módulo da velocidade em função da coordenada x para 0.1cm abaixo do isolador superior	78
Figura 5.12–Vista superior (em corte) da distribuição do módulo da velocidade na parte central da câmara de tratamento	78
Figura 5.13–Distribuição 3D da temperatura dentro da câmara de tratamento para suco de uva ($V = 24kV$, $t = 300us$ and $r_i = 1cm$)	82
Figura 5.14–Distribuição radial de temperatura para diferentes valores da altura z ($V = 24kV$, $t = 300us$ and $r_i = 1cm$)	82
Figura 5.15–Temperatura do suco de uva durante a aplicação do trem de pulsos para frequências de 57.7Hz e 100Hz ($V = 24kV$, $t = 300us$ e $r_i = 1cm$)	83
Figura 5.16–Temperatura média do líquido durante aplicação do trem de pulsos para sucos de uva e laranja	84

Figura 5.17–Gráfico Quantil-Quantil (QQ) dos resíduos gerados pelo modelo de regressão de $E_p(kV/cm)$	86
Figura 5.18–Curvas Pareto para suco de uva contendo bactéria <i>E. coli</i> para diferentes limites inferiores do tempo de tratamento	89
Figura 5.19–Comparativo entre curvas Pareto para <i>S. aureus</i> e <i>E. coli</i>	90
Figura 5.20–Inativação microbiana em função dos valores do campo elétrico obtido a partir do conjunto de soluções ótimas aproximadas para <i>S. aureus</i> e <i>E. coli</i>	91
Figura 5.21–Inativação microbiana em função dos valores do tempo de tratamento obtidos a partir do conjunto de soluções ótimas aproximadas para <i>S. aureus</i> e <i>E. coli</i>	91
Figura 5.22–Inativação microbiana e densidade de energia em função do campo elétrico obtido a partir do conjunto de soluções ótimas aproximadas para bactéria <i>E. coli</i>	92
Figura 5.23–Curvas Pareto para suco de uva contendo bactéria <i>E. coli</i> para $0.5 \leq r_i \leq 1.0$ e $r_i = 1cm$	93
Figura 5.24–Densidade de energia para <i>E. coli</i> em suco de uva em função dos valores de campo elétrico para $0.5 \leq r_i \leq 1.0cm$ e $r_i = 1cm$	94
Figura 5.25–Comparativo de resultados de inativação microbiana e densidade de energia entre modelo computacional e da literatura (HUANG et al., 2014) para a bactéria <i>E. coli</i>	95
Figura 5.26–Comparativo de resultados de inativação microbiana e densidade de energia entre modelo computacional e da literatura (HUANG et al., 2014) para a bactéria <i>S. aureus</i>	96
Figura 5.27–Comparação entre curvas Pareto estimadas e resultados do COMSOL ^{MR} para <i>S. aureus</i> e <i>E. coli</i>	96
Figura 5.28–Condutividade dos sucos de uva e laranja em função da temperatura	97
Figura 5.29–Inativação microbiana para <i>E. coli</i> em função do tempo de tratamento para sucos de uva e laranja ($E = 21kV/cm$)	99
Figura 5.30–Curvas Pareto estimadas para diferentes tipos de suco	100
Figura 5.31–Sistema de tratamento de dois estágios	101
Figura 5.32–Curvas Pareto estimadas para sistema de dois estágios em cascata	102
Figura 5.33–Curvas Pareto estimadas para sistemas de três estágios em cascata	102
Figura 5.34–Comparação entre modelos de predição de Weibull e Hulsheger e Niemman	104

Lista de tabelas

Tabela 4.1 – Dados geométricos da malha de elementos finitos	44
Tabela 4.2 – Dados utilizados para definição do tipo de malha	50
Tabela 4.3 – Propriedades físicas dos materiais utilizados nos eletrodos e isoladores .	51
Tabela 4.4 – Expressões das propriedades físico-químicas dos sucos de uva e laranja	52
Tabela 4.5 – Fatores e respectivos níveis do planejamento experimental computacional	59
Tabela 5.1 – Organização dos resultados	67
Tabela 5.2 – Fatores e respectivos níveis do planejamento experimental para geome- tria de eletrodos cilíndricos tipo "agulha"	69
Tabela 5.3 – Fatores e respectivos níveis do planejamento experimental para geome- tria coaxial	69
Tabela 5.4 – Fatores e respectivos níveis do planejamento experimental para geome- tria de eletrodos planos paralelos	69
Tabela 5.5 – Viscosidade dinâmica mínima e densidade média para sucos de uva e laranja	79
Tabela 5.6 – Resultados dos parâmetros de escoamento para sucos de uva e laranja para diferentes raios do eletrodo interno	80
Tabela 5.7 – Resultados do tempo de trânsito, período e frequência do pulso para cada tipo de suco	81
Tabela 5.8 – Matriz de planejamento experimental e resultados de campo elétrico .	85
Tabela 5.9 – Parâmetros do modelo de <i>Weibull</i> para <i>E. coli</i> e <i>S. aureus</i>	88
Tabela 5.10–Variáveis e funções objetivo de pontos selecionados das curvas Pareto estimadas	92
Tabela 5.11–Parâmetros do modelo de <i>Weibull</i> para <i>E. coli</i> em sucos de uva e laranja	98
Tabela 5.12–Parâmetros do modelo de <i>Hulshege e Niemman</i> para bactéria <i>E. coli</i> em sucos laranja	103
Tabela C.1 – Matriz de planejamento experimental e resultados para geometria de eletrodos cilíndricos tipo "agulha"	129
Tabela C.2 – Matriz de planejamento experimental e resultados para geometria coaxial	130
Tabela C.3 – Matriz de planejamento experimental e resultados para geometria de eletrodos planos paralelos	131

Lista de Símbolos

β	Coeficiente de forma do modelo de <i>Weibull</i>
β'	Coeficiente de forma do modelo de <i>Weibull</i> (equação exponencial)
β_{av}	Coeficiente de forma médio do modelo de <i>Weibull</i>
δ	Parâmetro do modelo de <i>Weibull</i> que representa o o tempo no qual a inativação microbiana $\log_{10}S(t)$ é igual à -1
δ'	Parâmetro do modelo de <i>Weibull</i> (equação exponencial) que representa o tempo necessário para reduzir a 90% a população inicial de microrganismos
B	Vetor campo magnético
E	Vetor campo elétrico
μ	Viscosidade dinâmica do líquido
μ_{min}	Viscosidade dinâmica mínima do fluido
$\overline{E_p}$	Campo elétrico médio ponderado
$\overline{T_p}$	Temperatura média ponderada
ρ	Densidade do líquido
ρ_m	Densidade média do fluido
$\sigma(T)$	condutividade elétrica dependente da temperatura do meio
σ_E	Desvio padrão do campo elétrico
<i>n</i>	Vetor de direção normal
<i>v</i>	Velocidade do fluido
b_e	Coeficiente do modelo de <i>Hulshege e Niemmanque</i> que representa a inclinação da curva de $\ln(S)$ em função do campo elétrico aplicado
b_t	Coeficiente do modelo de <i>Hulsheger e Niemman</i> que representa a inclinação da curva de $\ln(S)$ em função do tempo de tratamento
$C_p(T)$	Capacidade térmica do líquido
CV	Coeficiente de variação do campo elétrico

D_{ext}	Diâmetro externo da geometria coaxial
d_e	Distância entre eletrodos planos paralelos
$D_{H_{max}}$	Diâmetro hidráulico máximo da geometria coaxial
D_H	Diâmetro hidráulico da geometria
D_{int}	Diâmetro interno da geometria coaxial
d_i	Limite inferior da variável dimensional para sistemas estáticos
d_s	Limite superior da variável dimensional para sistemas estáticos
E	Módulo do campo elétrico
E_i	Módulo do campo elétrico em cada elemento da malha
E_r	Campo elétrico obtido através do ajuste por regressão
E_{cp}	Campo elétrico crítico em função do número de pulsos para o modelo de <i>Peleg</i>
E_c	Campo elétrico crítico do modelo de <i>Hulsheger e Niemman</i>
f_p	Frequência dos pulsos
h	Coeficiente de transferência de calor
I_r	Função objetivo da taxa de inativação
k	Condutividade térmica do líquido
k_{ar}	Condutividade térmica do ar
$k_{cp}(n)$	Inclinação da curva S x E em função do número de pulsos para o modelo de <i>Peleg</i>
k_c	Fator do modelo de <i>Hulsheger e Niemman</i> específico para cada microrganismo resultante da regressão de dados experimentais
L	Dimensão vertical do eletrodo externo
m	Massa do fluido
n	Número de pulsos
N_f	Concentração final de microrganismos
N_i	Concentração inicial de microrganismos
n_m	Número máximo de pulsos

N_u	Número de <i>Nusselt</i>
nel	Número de elementos da malha
P	Pressão no líquido
p'	Parâmetro do modelo de <i>Weibull</i> (equação exponencial) que representa a concavidade da curva $\log_{10}(S)$ x t
Q	Calor gerado no líquido por efeito Joule
Q_m	Vazão mássica
Q_{sr}	Função objetivo da densidade de energia
Q_s	Densidade de energia
r	Raio dos eletrodos da geometria cilíndrica
r_e	Raio externo da geometria coaxial
Re	Número de <i>Reynolds</i>
r_i	Raio do eletrodo interno da geometria coaxial
S	Taxa de sobrevivência
T	Temperatura do líquido
t	Tempo de tratamento
T_i	Temperatura em cada elemento da malha
t_c	Tempo de tratamento crítico do modelo de <i>Hulsheger e Niemman</i>
T_{ext}	Temperatura ambiente
t_i	Limite inferior do tempo de tratamento
T_p	Período do pulso aplicado
t_s	Limite superior do tempo de tratamento
t_t	Tempo de trânsito
u	Consumo de energia no líquido
V	Potencial elétrico
v_i	Volume de cada elemento da malha

v_l	Volume do líquido dentro da câmara de tratamento
V_m	Tensão induzida na membrana
V_i	Limite inferior da tensão aplicada
v_m	Módulo da velocidade média do fluido
V_s	Limite superior da tensão aplicada

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Relevância do Tema	1
1.2	Objetivos	2
1.3	Contribuições do Trabalho	3
1.4	Organização do Texto	5
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
2.1	Introdução	6
2.2	Breve Histórico da Tecnologia	6
2.3	Sistema Típico de Tratamento de Líquidos por Pulsos de Alta Tensão	7
2.4	Descrição do Fenômeno	9
2.5	Fatores Críticos	9
2.5.1	Parâmetros Elétricos	10
2.5.2	Parâmetros do Meio Líquido	12
2.5.3	Parâmetros Biológicos	14
2.6	Câmaras de Tratamento	16
2.7	Simulações Numéricas	18
2.8	Modelos de Predição da Inativação Microbiana	21
2.9	Estado da Arte da Tecnologia	24
2.10	Considerações Finais	25
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	27
3.1	Introdução	27
3.2	Planejamento Experimental	27
3.3	Métodos Numéricos	30
3.3.1	Método dos Elementos Finitos	30
3.3.2	A Equação de Laplace para Meios Condutivos	31
3.3.3	Aplicação do Método dos Resíduos Ponderados	32
3.4	Otimização Multiobjetivo	34
3.4.1	O Problema Multiobjetivo	34
3.4.2	Algoritmos Evolutivos Multiobjetivos	35
3.4.3	NSGA-II	37
3.5	Considerações Finais	38
4	MODELO COMPUTACIONAL	41
4.1	Introdução	41

4.2	Visão Geral do Modelo Computacional para Sistemas Estáticos . . .	41
4.2.1	Geometrias e Malhas de Elementos Finitos	42
4.2.2	Cálculos numéricos pós processamento	44
4.2.2.1	Campo elétrico	44
4.2.2.2	Inativação microbiana	45
4.2.2.3	Densidade de energia	45
4.2.3	Formulação Matemática para o Problema de Otimização Multiobjetivo . . .	46
4.3	Visão Geral do Modelo Computacional para Sistemas Dinâmicos . .	46
4.3.1	Modelagem no COMSOL ^{MR} Multiphysics	47
4.3.1.1	Geometria e Malha de Elementos Finitos	47
4.3.1.2	Propriedades dos Materiais	51
4.3.1.3	Forma de Onda do Pulso Aplicado	51
4.3.1.4	Modelagem eletrostática	53
4.3.1.5	Modelagem térmica	55
4.3.1.6	Modelagem da dinâmica do fluido	56
4.3.2	Processamento	58
4.3.3	Cálculos numéricos pós processamento	59
4.3.3.1	Campo elétrico	59
4.3.3.2	Temperatura	60
4.3.3.3	Velocidade do fluido e frequência dos pulsos	60
4.3.4	Formulação Matemática para o Problema de Otimização Multiobjetivo . . .	62
4.4	Considerações Finais	65
5	RESULTADOS E ANÁLISE	67
5.1	Introdução	67
5.2	Resultados para Sistemas Estáticos	67
5.2.1	Fatores e Níveis do Planejamento Experimental	68
5.2.2	Distribuição de Campo Elétrico	68
5.2.3	Planejamento Experimental e Ajustes por Regressão	69
5.2.4	Comparação das Curvas Pareto Estimadas	71
5.2.5	Comparativo dos Resultados entre COMSOL ^{MR} e MatLab ^{MR}	73
5.3	Resultados para Sistemas Dinâmicos	74
5.3.1	Distribuição de Campo Elétrico	74
5.3.2	Análise do Escoamento do Fluido	77
5.3.3	Análise Térmica	80
5.3.4	Resultados Pós-processamento	84
5.3.4.1	Resultados da Matriz DOE	84
5.3.4.2	Ajustes por Regressão Não Linear	85
5.4	Estudos de Caso	87

5.4.1	Estudo de Caso 1: Comparativo entre Diferentes Microrganismos em Sucos de Uva	87
5.4.2	Estudo de caso 2: Comparação entre Diferentes Tipos de Líquidos	97
5.4.3	Estudo de caso 3: Sistemas em Cascata	100
5.4.4	Estudo de caso 4: Comparação entre Modelos de Predição	103
5.5	Considerações Finais	104
6	CONCLUSÕES	107
6.1	Principais Conclusões	107
6.2	Proposta de Continuidade de Estudos	109
	REFERÊNCIAS	111
A	PUBLICAÇÕES	120
A.1	Periódico	120
A.2	Conferências	120
B	CÓDIGO FONTE DO ALGORITMO DE ELEMENTOS FINITOS	121
C	RESULTADOS DO PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL - SISTEMAS ESTÁTICOS	129
C.1	Matrizes de Planejamento Experimental	129
C.2	Modelos de Regressão	129
C.2.1	Equações do modelo de Regressão para Geometria de Eletrodos Cilíndricos	129
C.2.2	Equações do modelo de Regressão para Geometria Coaxial	130
C.2.3	Equações do modelo de Regressão para Geometria de Eletrodos Planos Paralelos	131

1 Introdução

1.1 Relevância do Tema

O número crescente e a gravidade de doenças transmitidas por alimentos contaminados em todo o mundo têm aumentado consideravelmente o interesse das autoridades e do público em relação à segurança alimentar (FORSYTHE, 2013). O método de pasteurização, o qual consiste em submeter o produto a uma determinada temperatura, por um determinado tempo, é o tratamento convencional que visa reduzir o número de bactérias patogênicas ou degradadoras no produto alimentício.

A aplicação de pulsos de alta tensão para tratamento de líquidos é uma tecnologia emergente para tratamento de líquidos, sendo alternativa ao método térmico convencional. A tecnologia envolve a aplicação de pulsos elétricos de alta tensão através de eletrodos inseridos em uma câmara de tratamento contendo o líquido. No Brasil, o estudo de sistemas com aplicação por pulsos de alta tensão ainda é embrionário. Em (SILVA et al., 2009), foram reportados estudos para tratamento da bactéria *E. coli* em amostras de leite inseridas em câmara de tratamento composta de eletrodos cilíndricos planos paralelos mediante variação do número de pulsos e tensão aplicada. Um estudo experimental para análise de efeitos de vários parâmetros de um sistema de tratamento por pulsos elétricos na inativação da peroxidase e outras enzimas em sucos de cenoura, além da comparação com o tratamento térmico convencional, foi descrito em (TEIXEIRA et al., 2008). A pesquisa e desenvolvimento de tecnologias alternativas para tratamento de líquidos é relevante para a economia nacional, considerando, por exemplo, que o Brasil é responsável por cerca de 50% da produção mundial de sucos de laranja (OLIVEIRA; OLIVEIRA; SILVA, 2015).

A eficiência do tratamento de um sistema PEF (do inglês, *Pulsed Electric Field*), representada pela inativação microbiana do microrganismo em tratamento, está relacionada principalmente com a distribuição de campo elétrico e com o tempo de tratamento (número de pulsos $\times$ duração do pulso) sendo desejável uma distribuição de campo elétrico mais uniforme possível e com magnitude suficiente para obter níveis de inativação dentro das especificações para consumo de um dado produto alimentício. Outro parâmetro de interesse em um sistema de tratamento por PEF é a densidade de energia, sendo a razão entre o consumo energético do sistema pelo volume de líquido tratado, com impacto representativo na viabilidade econômica de operação de um sistema. A densidade de energia pode ser calculada em função do quadrado do campo elétrico e do tempo de tratamento, sendo um parâmetro de monitoramento importante também no sentido de indicar que o tratamento por PEF está mantendo suas características não térmicas, considerando sua relação com a dissipação térmica do líquido em tratamento (PEÑA; ELEZ-MARTÍNEZ; MARTÍN-

BELLOSO, 2011); (SWAMI et al., 2010). Em (RODRIGUEZ-GONZALEZ et al., 2015), foi realizado um estudo comparativo relacionado com o consumo energético e densidades de energia de várias tecnologias de tratamento de líquidos. Baseado nos dados de experimentos coletados da literatura e estimativa das densidades de energia, os autores concluíram que há um grande potencial para desenvolvimento de equipamentos e sistemas do ponto de vista de eficiência energética, considerando que, apesar de ser um método não térmico, a faixa de densidade de energia obtida para a tecnologia PEF foi significativa em relação aos resultados para o tratamento térmico convencional, representando cerca de 30% da densidade energética obtida com o tratamento térmico. Alguns sistemas de pasteurização térmicos utilizam processos de reaproveitamento do calor gerado no aquecimento do líquido (*heat recovery*) para pré-aquecimento do líquido na entrada do sistema, reduzindo a energia dos sistemas convencionais de pasteurização, nos quais as taxas de recuperação de calor até 95% podem ser alcançadas. Segundo (TOEPFL et al., 2006), a otimização das câmaras de tratamento e parâmetros de processo podem reduzir custos de operação para tratamento de alimentos líquidos por PEF de forma que os mesmos sejam competitivos em relação aos processos térmicos com reaproveitamento de calor. Desta forma, com base nos aspectos abordados, os impactos do consumo de energia e, conseqüentemente, da densidade de energia devem ser levados em consideração no projeto e implementação de processos utilizando a tecnologia PEF.

O aumento na inativação microbiana de microrganismos em função de um aumento do campo elétrico aplicado e/ou aumento do tempo de tratamento eleva, por consequência, a densidade de energia do sistema em função do aumento no consumo energético, o que pode aumentar o custo operacional do processo. Diante desta dualidade da eficiência do ponto de vista microbiológico, mensurada pela inativação microbiana, e da eficiência energética, mensurada pela densidade de energia, pode-se dizer que a inativação microbiana e a densidade de energia são objetivos conflitantes, configurando um problema de otimização multiobjetivo, o qual constitui objeto de estudo desta tese.

1.2 Objetivos

O principal objetivo do presente trabalho é o desenvolvimento de uma ferramenta computacional capaz de gerar soluções ótimas aproximadas para a inativação microbiana de microrganismos e densidade de energia de um sistema de tratamento de líquidos por aplicação de pulsos de alta tensão em função de parâmetros da fonte de alta tensão e da geometria de eletrodos inseridos dentro de uma câmara de tratamento, por meio de uma análise acoplada envolvendo distribuição de campo elétrico, análise térmica e de escoamento do fluido.

Os objetivos específicos do estudo são:

- Analisar a eficiência de um sistema de tratamento com câmaras estáticas, comparando diferentes arranjos de eletrodos;
- Avaliar a eficiência de um sistema de tratamento de sistemas dinâmicos através da análise acoplada da distribuição de campo elétrico, temperatura e escoamento do líquido;
- Aplicar a metodologia computacional em diferentes tipos de microrganismos e líquidos, analisando a influência dos parâmetros do meio e da resistência dos microrganismos na eficiência do sistema;
- Analisar sistemas multi-estágios de tratamento do ponto de vista de otimização, visando um aumento da inativação microbiana;
- Comparar curvas Pareto obtidas através do modelo computacional para diferentes modelos de predição de inativação microbiana;
- Avaliar a uniformidade da distribuição de campo elétrico para análise da homogeneidade do tratamento.

1.3 Contribuições do Trabalho

Alguns estudos experimentais associam a inativação microbiana com a densidade de energia para diferentes valores de campo elétrico e temperatura, visando analisar a eficiência do sistema em diferentes condições. A inativação da bactéria *E. coli* em solução de *Ringer* em função da densidade de energia para diferentes temperaturas, considerando valores de campo elétrico entre $16kV/cm$ e $20kV/cm$ foi investigada em (TOEPFL; HEINZ; KNORR, 2007). A inativação microbiana em função do tempo de tratamento e densidade de energia para três diferentes tipos de microrganismos de suco de uva foi analisada em (HUANG et al., 2014). Os estudos computacionais reportados nesta tese podem ser aplicados previamente a estudos experimentais, de forma que seja possível uma melhor compreensão da relação entre a inativação e a densidade de energia e a realização de ajustes nas variáveis de projeto para buscar o ponto ótimo de operação do sistema PEF.

Estudos de modelagem aplicados à tecnologia PEF geralmente acoplam a análise de campo elétrico e temperatura, sendo que alguns deles incorporam a análise de fluidodinâmica. A influência da temperatura na inativação microbiana em uma câmara estática de tratamento com eletrodos planos paralelos utilizando análise acoplada de campo elétrico e térmica foi investigada em (SALDAÑA et al., 2010). Um algoritmo iterativo capaz de otimizar a forma geométrica de um arranjo de eletrodos co-lineares baseado em uma análise de distribuição de campo elétrico e em um indicador de desempenho ponderado por vários fatores relevantes para a eficiência de uma câmara de tratamento foi proposto em (KNOERZER; BAUMANN; BUCKOW, 2012). Em (HUANG et al., 2013), simulações multifísicas foram realizadas para comparar as geometrias de eletrodos coaxial e co-linear.

Os resultados das simulações indicaram um melhor desempenho da geometria coaxial em relação à distribuição de campo elétrico e temperatura. Em nenhum dos estudos mencionados, a análise acoplada termo-elétrica foi integrada com otimização multiobjetivo.

Dentro do contexto apresentado, a principal contribuição do trabalho é o desenvolvimento de um modelo computacional para otimização de câmaras de tratamento considerando a inativação microbiana e a densidade de energia como objetivos conflitantes, baseando-se numa análise elétrica-térmica-fluidodinâmica acoplada, sendo capaz de prover um conjunto de soluções em relação a aspectos dimensionais de câmaras de tratamento e variáveis de processo, o que possibilita ao projetista um conjunto mais amplo de opções para fins de tomada de decisão. Além disso, através desta metodologia computacional é possível definir protocolos de operação do sistema para diferentes tipos de líquidos, através da especificação da tensão aplicada, tempo de tratamento e limites de temperatura para diferentes tipos de fluidos.

Adicionalmente, outras contribuições do trabalho podem ser citadas, conforme segue:

- A associação de modelos de predição de inativação microbiana (*Weibull* e *Hulsheger*) com modelos numéricos capazes de prover distribuições de campo elétrico, temperatura e escoamento do fluido em câmaras de tratamento. A partir dos cálculos numéricos destas grandezas e, com base nos parâmetros de resistência dos microrganismos ao tratamento, os modelos de predição estimam a inativação microbiana do microrganismo para um determinado tipo de fluido. A incorporação de modelos de predição em simulações numéricas é uma inevitável tendência para o desenvolvimento da tecnologia PEF ([HUANG et al., 2012](#));

- A definição da frequência dos pulsos aplicados em sincronismo com o tempo de trânsito do fluido dentro da câmara de tratamento para escoamentos do tipo laminar, com base em parâmetros físico-químicos dos líquidos investigados. Isto possibilita especificar a frequência dos pulsos da fonte de alta tensão de forma mais assertiva;

- A definição do número de pulsos aplicados e, conseqüentemente do tempo de tratamento, a partir do limite térmico definido para o líquido, incorporando a restrição da faixa de tempo de tratamento no algoritmo de otimização multiobjetivo. Essa definição é relevante no sentido de manter a característica não térmica da tecnologia;

- A possibilidade de comparar a eficiência de diferentes tipos de líquidos/microrganismos através de um conjunto de soluções geradas pelo modelo computacional, permitindo uma visibilidade da adequação da câmara de tratamento para tratamento de diferentes cargas do sistema.

1.4 Organização do Texto

Esta tese está dividida nos seguintes capítulos:

Capítulo 2 - Revisão Bibliográfica: apresenta um estudo crítico sobre o tema, com uma visão geral da tecnologia, abrangendo seu histórico, fatores impactantes na eficiência de um sistema, modelos de predição, estudos envolvendo simulações numéricas realizadas pelos principais grupos de pesquisa e o estado da arte sobre a tecnologia PEF.

Capítulo 3 - Fundamentação Teórica: a base teórica para os modelos computacionais implementados é apresentada, abordando os principais conceitos de planejamento experimental, Método dos Elementos Finitos, aplicado ao cálculo de campo elétrico, além de conceitos de otimização multiobjetivo, com ênfase no algoritmo NSGA-II;

Capítulo 4 - Modelo Computacional: apresenta, em síntese, o modelo computacional estático, utilizado em simulações iniciais, e com detalhamento do modelo dinâmico proposto para gerar soluções ótimas aproximadas envolvendo a inativação microbiana e a densidade de energia. O modelo estático é baseado em um algoritmo de elementos finitos implementado no MatLab^{MR} associado com algoritmo de otimização multiobjetivo NSGA-II. O modelo dinâmico utiliza o pacote comercial COMSOL^{MR} e incorpora a análise térmica e de escoamento do fluido.

Capítulo 5 - Resultados e Análise: apresenta os resultados do trabalho computacional. Inicialmente, são apresentados alguns resultados obtidos em simulações com o modelo estático. A seguir, são apresentados os resultados do modelo dinâmico com as análises do escoamento do fluido, distribuição de campo elétrico e temperatura. Adicionalmente, são apresentados os resultados de estudos de caso envolvendo a aplicação do método computacional em diferentes tipos de líquidos/ microrganismos, sistemas multi-estágios e modelos de predição.

Capítulo 6- Conclusões: apresenta uma síntese dos principais resultados e contribuições do trabalho, além de propostas de continuidade de estudos baseadas nos resultados alcançados.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Introdução

Atualmente, há uma crescente demanda por produtos alimentícios de alta qualidade no que se refere a valores nutritivos e características sensoriais. Considerando que os métodos de tratamento térmicos convencionais normalmente afetam o sabor e valor nutricional dos alimentos, pesquisas por tecnologias não térmicas evoluíram consideravelmente nas últimas décadas. Dentre estas tecnologias, o processamento por aplicação de pulsos de alta tensão tem apresentado níveis de tratamento de líquidos contendo microrganismos patogênicos dentro dos limites de aceitação para consumo (GAD; JAYARAM, 2015).

A tecnologia de tratamento PEF envolve a aplicação de pulsos de alta magnitude, gerando campo elétrico na faixa de 10 a 80kV/cm, e de curta duração (*us*) em eletrodos inseridos dentro de uma câmara de tratamento contendo o líquido a ser tratado (MIKŠ-KRAJNIK et al., 2015). Trata-se de um método promissor para tratamento de líquidos, podendo ser uma alternativa ou complementação ao método térmico convencional de pasteurização. Em comparação com outros métodos de tratamento, a principal vantagem da tecnologia é o processamento em fluxo contínuo durante intervalo de tempo baixo (HUANG et al., 2014). A eficiência de um tratamento por PEF depende das variáveis do sistema, principalmente da magnitude do campo elétrico aplicado, do tempo de tratamento e de propriedades do produto líquido, tal como a condutividade do produto em tratamento (KNOERZER; BAUMANN; BUCKOW, 2012).

Neste capítulo, é apresentada uma revisão bibliográfica sobre o tema, abrangendo um breve histórico da tecnologia, descrição do fenômeno físico, parâmetros do sistema que impactam na eficiência do tratamento, modelos de predição, câmaras de tratamento, os principais trabalhos envolvendo simulações numéricas e o estado da arte sobre a tecnologia.

2.2 Breve Histórico da Tecnologia

O primeiro trabalho investigativo que sugeriu uma ruptura reversível da membrana celular ao aplicar pulsos elétricos de alta tensão foi publicado em (STAMPFLI, 1958). Na década seguinte, o engenheiro alemão Heinz Doevenspeck realizou alguns experimentos de aplicação de pulsos de alta tensão para ruptura de células, tendo seu trabalho resultado em uma patente (DOEVENSPECK, 1961). Até o ano de 1983, Doevenspeck conduziu várias pesquisas em conjunto com empresas e institutos de pesquisa. No campo científico, na década de 60, Sales e Hamilton conduziram estudos para investigar os efeitos dos pulsos

elétricos de alta tensão e os mecanismos para eliminação de bactérias. Evidenciaram, mediante experimentos, que a intensidade de campo elétrico e o tempo de tratamento são os principais fatores que influenciam no desempenho do sistema, além de que a mortalidade de microrganismos está relacionada a fatores não térmicos (SALE; HAMILTON, 1967).

No início dos anos 80, um grupo de cientistas, liderado por Hülshager, desenvolveu o primeiro modelo matemático para descrever a sobrevivência de microrganismos à aplicação de pulsos de alta tensão (HÜLSHEGER; POTEL; NIEMANN, 1981). A partir de 1985, numa parceria entre Doevenspeck e a Empresa alemã Krupp, foram desenvolvidos os equipamentos registrados como TMELCRACK e TMELSTERIL, sendo as primeiras tentativas de comercialização da tecnologia (SITZMANN; VOROBIEV; LBOVKA, 2016). Porém, falhas técnicas inviabilizaram a continuidade de operação dos equipamentos.

Em 1990, foi realizada uma parceria na Europa e nos EUA entre empresas do ramo alimentício, fabricantes de equipamentos e universidades para desenvolvimento de equipamentos e aplicações da tecnologia PEF. Em 1995, um sistema de fluxo contínuo foi lançado pela Empresa PurePulse, uma subsidiária da Empresa Maxwell Laboratories, tendo sido este um dos fatores que impulsionaram as pesquisas na década de 90. Em 2006, o primeiro sistema comercial foi instalado nos EUA para tratamento de sucos de frutas orgânicos, sendo aprovado pelo FDA (*Food and Drug Administration*). Porém, este projeto foi abortado em função de limitações técnicas e comerciais (BUCKOW; NG; TOEPFL, 2013). Em 2009, uma linha de produção industrial de sucos foi instalada na Europa para processamento de sucos, com capacidade para 1500 litros/h. Até 2012, em nível mundial, aproximadamente 30 unidades comerciais estavam em operação (TOEPFL, 2012).

Atualmente, apesar dos recentes avanços da tecnologia e a introdução de equipamentos no mercado, o alto custo de aquisição dos equipamentos e a inviabilidade para promover a troca dos sistemas de alta capacidade de produção já instalados por uma nova tecnologia limitam a comercialização. Por outro lado, a preservação da qualidade do líquido por este tratamento pode favorecer a inserção de mais equipamentos no mercado (PASSOS; RIBEIRO, 2016).

Uma das evidências de que a tecnologia tem demonstrado interesse na comunidade científica é o número crescente de publicações sobre o assunto nas últimas décadas, conforme mostrado na Figura 2.1, atingindo cerca de 650 publicações no último ano.

2.3 Sistema Típico de Tratamento de Líquidos por Pulsos de Alta Tensão

Em geral, um sistema de típico de tratamento por pulsos de alta tensão consiste de um gerador de pulsos de alta tensão, câmara de tratamento, bomba, sistema de

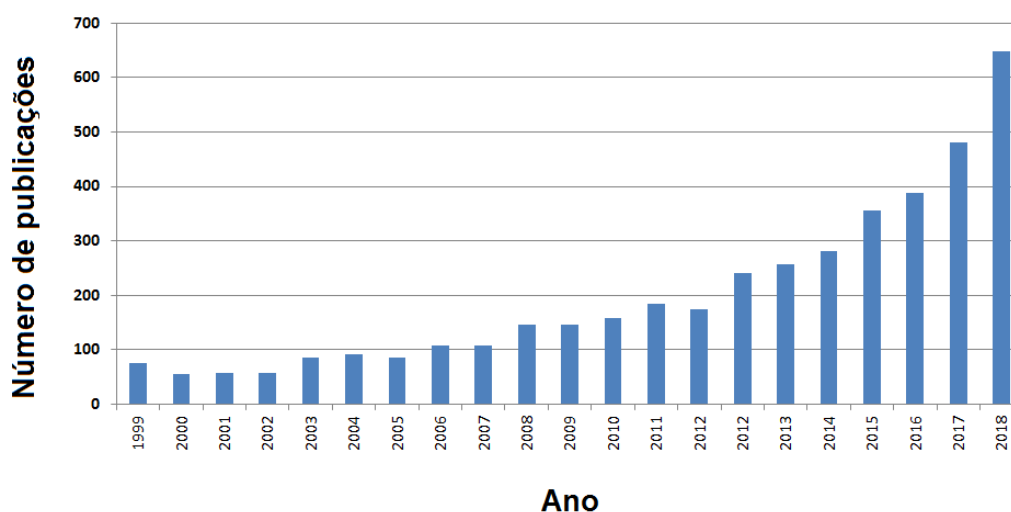


Figura 2.1 – Publicações científicas sobre o tema PEF em processamento de alimentos líquidos nas últimas duas décadas (Fonte: Science Direct)

resfriamento e sistema de controle de parâmetros da fonte e da câmara de tratamento, conforme mostrado na Figura 2.2. O produto líquido a ser tratado é bombeado para a câmara de tratamento, na qual existem dois eletrodos conectados à fonte geradora de pulsos de alta tensão (MOHAMED; AYMAN; EISSA, 2012). A fonte de alta tensão associada com as características dimensionais da câmara de tratamento e propriedades do líquido definem a distribuição de campo elétrico dentro do líquido em tratamento.

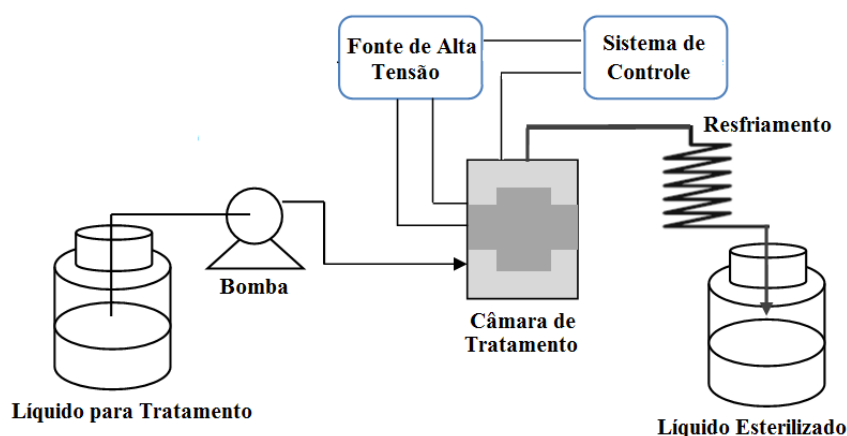


Figura 2.2 – Diagrama esquemático de um sistema der tratamento de líquidos por pulsos de alta tensão - adaptado de (MOHAMED; AYMAN; EISSA, 2012)

De acordo com (HUANG et al., 2013), o projeto da câmara de tratamento é um dos pontos cruciais no desenvolvimento de um sistema, considerando o impacto da geometria da câmara na distribuição de campo elétrico. A pesquisa aqui desenvolvida é direcionada a este elemento do sistema, através da implementação de um modelo computacional que visa otimizar o tratamento e eficiência energética de diferentes arranjos de eletrodos.

2.4 Descrição do Fenômeno

O fenômeno básico que rege o processo de tratamento por PEF é denominado eletroporação, o qual consiste na aplicação de pulsos de alta tensão na estrutura celular, produzindo microporos na membrana da célula. O fenômeno pode ser reversível ou irreversível. Quando a intensidade do campo elétrico aplicado e/ou duração do pulso são suficientemente elevados, a membrana pode perder sua função de barreira de permeabilidade entre o citoplasma e o meio externo, levando a célula à destruição. Neste caso, o fenômeno é irreversível e pode ser aplicado em sistemas de tratamento de líquidos para eliminação de microrganismos patogênicos, tais como bactérias e fungos. No caso do campo elétrico e/ou duração do pulso não serem suficientemente elevados, os poros abertos na membrana celular podem ser fechados novamente após aplicação do pulso, sendo o fenômeno reversível, encontrando aplicações principalmente na engenharia genética, para introdução de fármacos ou DNA nas células (JAYARAM, 2000).

O conceito fundamental para explicar a eletropermeabilização da membrana celular é a tensão induzida na membrana ΔV_m , resultante da aplicação de um campo elétrico externo na estrutura celular, conforme Figura 2.3 (BURGAIN-CHAIN; SCHERMAN, 2013). Por exemplo, para uma célula esférica, o valor da tensão é dado pela Equação (2.1) (TEISSIE; GOLZIO; ROLS, 2005). Nesta função, $g(\sigma)$ é uma função dependente da condutividade do citoplasma, da membrana e do meio. O valor da tensão induzida na membrana depende do ângulo θ , sendo que o valor máximo da tensão induzida ocorre nos pólos da célula, onde o cosseno tem valor máximo (YARMUSH et al., 2014). Considerando que a tensão induzida é diretamente proporcional ao raio r da célula, as células de raios maiores são menos resistentes ao tratamento,

$$\Delta V_m = -1.5Eg(\sigma)rcos\theta \quad (2.1)$$

onde E representa o módulo do campo elétrico aplicado (kV/cm), r é raio da célula e θ é o ângulo (em radianos) entre a reta definida por um ponto na superfície da célula em relação ao centro da mesma.

2.5 Fatores Críticos

Os parâmetros que influenciam a eficiência de um sistema de tratamento por pulsos de alta tensão podem ser divididos em: parâmetros elétricos, parâmetros do meio líquido e parâmetros biológicos, os quais serão descritos nesta seção.

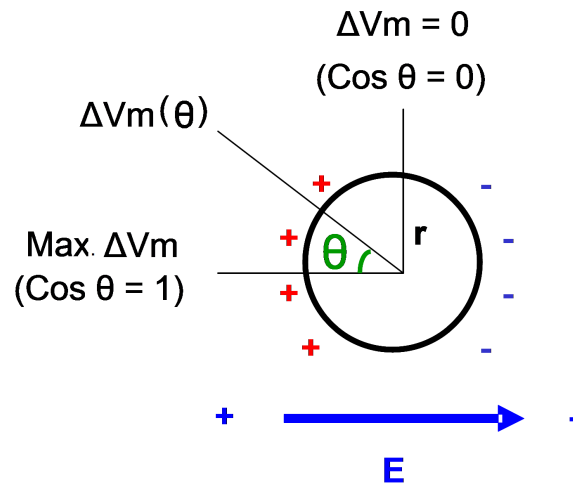


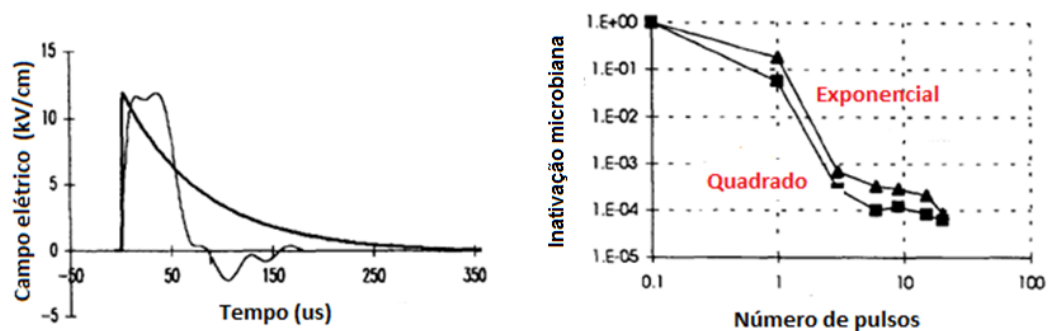
Figura 2.3 – Tensão induzida na membrana celular pela aplicação de campo elétrico externo - adaptado de (BURGAIN-CHAIN; SCHERMAN, 2013)

2.5.1 Parâmetros Elétricos

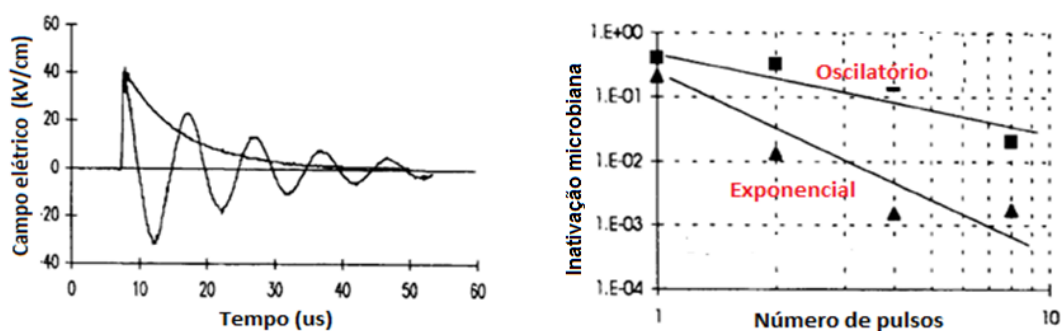
Os principais parâmetros elétricos que afetam a inativação microbiana de um sistema de tratamento por pulsos de alta tensão são: intensidade do campo elétrico, tempo de tratamento e forma de onda do pulso (BARBOSA-CANOVAS et al., 1999). O tempo de tratamento é o produto entre o número de pulsos e a duração do pulso. Aumentando a intensidade do campo elétrico aplicado e tempo de tratamento, aumenta a eficiência do tratamento, mensurada pelo aumento da inativação microbiana dos microrganismos (WOUTERS; ALVAREZ; RASO, 2001).

Em geral, os pulsos aplicados aos eletrodos podem ser quadrados, exponenciais ou oscilatórios. Em (QIN et al., 1994), foi feito um estudo comparativo da inativação microbiana do microrganismo *S. Cerevisiae*, variando a forma de onda aplicada, com intensidade de campo elétrico entre 12 e 40 kV/cm e largura do pulso entre 20 e 180 μ s. Os resultados são apresentados nos gráficos da Figura 2.4. Os pulsos com forma de onda quadrada resultam em maior inativação microbiana em relação aos pulsos exponenciais, considerando que neste caso há uma exposição das células a um nível de campo elétrico de maior intensidade durante a aplicação do pulso. Os pulsos exponenciais, em geral, resultam em uma maior inativação microbiana em relação aos pulsos oscilatórios. Apesar de resultar em uma maior eficiência, a geração de uma forma de onda quadrada requer circuitos da fonte mais complexos em relação aos geradores de pulsos exponenciais e oscilatórios. Nas simulações computacionais do presente estudo, assume-se a aplicação de pulsos de alta tensão com forma de onda quadrada.

O efeito da polaridade de pulsos foi estudado em (EVRENDILEK; ZHANG, 2005), aplicando pulsos quadrados monopolares e bipolares para tratamento de amostras de suco de maçã (pulsos de 7 kV e duração de 2.8 μ s) e leite desnatado (pulsos de 9 kV e duração de



(a)



(b)

Figura 2.4 – Comparativos de inativação microbiana para diferentes formas de onda: a) (Pulso quadrado x pulso exponencial; b) Pulso exponencial x pulso oscilatório - adaptado de (QIN et al., 1994)

4us). Não foram observadas diferenças significativas na inativação microbiana da bactéria *E. coli* nas amostras de suco de maçã. Porém, nas amostras de leite desnatado, a inativação microbiana foi maior ao aplicar pulsos bipolares. Em (QIN et al., 1994), a maior eficiência de tratamento pela aplicação de pulsos bipolares em experimentos para eliminação de líquido contendo as bactérias *E. coli*, *S. cerevisiae* e *B. subtilis* foi explicada pelo stress causado na membrana celular devido à reversão instantânea de polarização na aplicação de pulsos bipolares.

Em relação à frequência dos pulsos, em geral, a eficiência do tratamento do ponto de vista microbiológico é independente da frequência para um mesmo número de pulsos aplicados. Porém, um aumento de frequência do trem de pulsos, desde que seja sincronizada com a vazão do sistema, aumenta a capacidade do equipamento em litros/hora. A temperatura tende a aumentar à medida que a frequência aumenta, sendo que isto pode alterar as propriedades nutricionais do líquido em tratamento (ALVAREZ et al., 2003). Além disso, o aumento da frequência requer sistemas de chaveamento mais complexos da fonte de alta tensão, o que eleva o custo de projeto do sistema. Desta forma, a especificação

da frequência dos pulsos deve levar em consideração os aspectos mencionados.

2.5.2 Parâmetros do Meio Líquido

As características químicas e físicas do líquido a ser tratado podem influenciar significativamente na inativação microbiana dos microrganismos (WOUTERS; ALVAREZ; RASO, 2001). Dentre estas características, a condutividade elétrica, a atividade iônica, o pH do meio e a temperatura podem impactar na eficiência do tratamento (STOICA; BAHIM; CÂRÂC, 2011).

A aplicação da tecnologia é restrita aos líquidos com baixa condutividade (MOHAMMED; AYMAN; EISSA, 2012). A condutividade típica dos líquidos utilizados em sistemas de tratamento por PEF é de $0.3S/m$ e a faixa é de 0.01 a $10S/m$ (LOEFFLER, 2006). Um aumento na condutividade do líquido eleva a temperatura do mesmo durante a aplicação dos pulsos elétricos. Além disso, para uma tensão aplicada constante, quanto maior a condutividade, menor o campo elétrico líquido, em razão da menor resistência equivalente do meio líquido em comparação com a resistência do circuito equivalente de conexão dos eletrodos à fonte de alimentação. Desta forma, para obter a mesma magnitude de campo elétrico, para valores maiores de condutividade do meio, é necessário aumentar o valor da tensão aplicada. A condutividade também modifica a forma e largura do pulso (ALVAREZ; CONDON; RASO, 2006), devido à alteração da constante RC do circuito elétrico equivalente formado pelo líquido e parâmetros da fonte de tensão. A Figura 2.5 mostra o circuito equivalente de um sistema de tratamento por PEF. Quando a chave S está aberta, o capacitor C se carrega com tensão inicial U_0 através da resistência de carga R_c . Ao fechar a chave S, a carga armazenada no capacitor é descarregada através do circuito equivalente formado pela resistência da câmara de tratamento R_{ct} e pela resistência R_{con} , a qual representa a resistência dos cabos e conexões do circuito de carga até a câmara de tratamento.

Considerando as condutividades do citoplasma e membrana de uma célula, em torno de 1 e $10^{-3}S/m$, respectivamente, dependendo da condutividade do meio líquido, o campo elétrico aplicado pode induzir diferentes níveis de tensão na membrana celular, o que impacta também na inativação microbiana (JAYARAM, 2000). A redução da condutividade do meio deve ser moderada, considerando que o decréscimo da mesma pode elevar a constante de tempo do circuito elétrico equivalente da célula e reduzir o potencial da tensão induzida ΔV_m na membrana e, conseqüentemente, reduzir a eficiência do tratamento (PUCIHAR et al., 2001).

O impacto do pH do meio líquido em tratamento na eficiência do sistema é um dos fatores que mais tem gerado controvérsias na literatura. Alguns pesquisadores observaram que os microrganismos são mais sensíveis ao tratamento em meio ácido (GEVEKE; KOZEMPEL, 2003); (VEGA-MERCADO et al., 1996). Outros autores indicaram que a

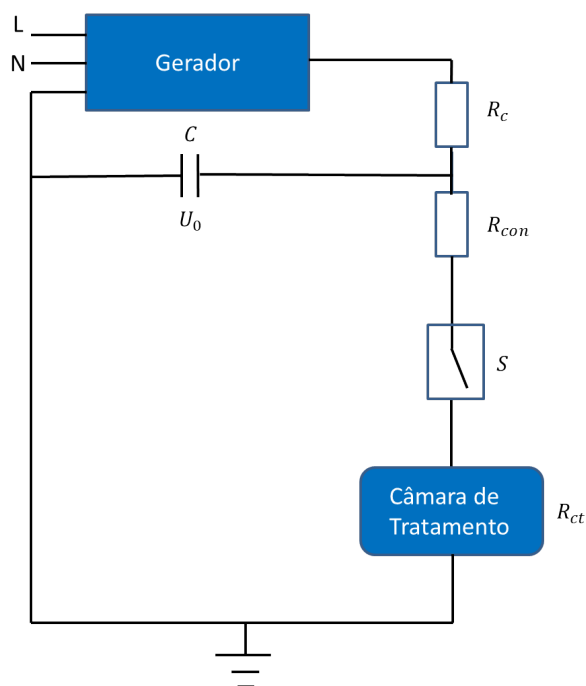


Figura 2.5 – Circuito elétrico equivalente de um sistema de tratamento por PEF

resistência ao tratamento foi menor em meios com pH neutro (JEANTET et al., 1999); (GARCÍA et al., 2003) ou o valor do pH do meio não teve influência na eficiência do tratamento (HEINZ; KNORR, 2000). A razão destas diferenças ainda não foi bem elucidada, podendo ser relacionada com o número de pulsos e a intensidade do campo elétrico aplicado em meios com baixo valor de pH ou com o tipo de microrganismo em estudo (STOICA; BAHIRIM; CÂRÂC, 2011).

A temperatura do meio tem um papel importante na eficiência de um sistema de tratamento por aplicação de pulsos de alta tensão. A aplicação da tecnologia em temperaturas moderadas tem sido sugerida como forma de intensificar a inativação microbiana (SEPULVEDA et al., 2005). Por outro lado, à medida que a temperatura cresce, as características nutricionais do líquido em tratamento podem ficar comprometidas. A faixa de temperatura mais indicada para o tratamento está na faixa de 10 a 45 °C, embora alguns trabalhos indiquem uma faixa mais restritiva de 15 a 25 °C (QIN et al., 1998); (HUANG; WANG, 2009).

O tratamento por aplicação de pulsos de alta tensão pode também ser combinado com o tratamento térmico convencional, aumentando a eficiência do tratamento através da sinergia entre os efeitos térmicos e do campo elétrico no líquido em tratamento (HEINZ; TOEPFL; KNORR, 2003). Neste caso, um pré-tratamento térmico pode ser realizado em uma faixa de temperatura mais baixa, reduzindo os efeitos do aquecimento nas propriedades sensoriais e nutricionais do líquido em tratamento.

2.5.3 Parâmetros Biológicos

Os fatores biológicos são determinantes para a eficiência de um sistema de tratamento por aplicação de pulsos de alta tensão. A sensibilidade de um microrganismo ao tratamento está relacionada com as características morfológicas e fisiológicas da célula, tais como: tamanho, forma e tipo da célula.

Conforme abordado na Seção 2.5.2, as células com diâmetros maiores são eliminadas com uma menor intensidade de campo elétrico, já que, quanto maior o tamanho da célula, maior o potencial induzido na membrana (KOTNIK et al., 2001). Os fungos, por exemplo, possuem uma maior sensibilidade ao tratamento em razão do maior tamanho da célula em relação às bactérias (STOICA; BAHIM; CÂRÂC, 2011). A forma da célula também impacta no potencial induzido na membrana devido às diferentes polarizações de carga e, conseqüentemente, para um mesmo valor de campo elétrico aplicado, na tensão induzida nas membranas, o que altera o grau de resistência do microrganismo ao tratamento (MUNOZ et al., 2004).

As bactérias se dividem em dois grupos: bactérias gram-positivas e bactérias gram-negativas. Em geral, as bactérias do tipo gram-positivo são mais resistentes ao tratamento por PEF do que as bactérias do tipo gram-negativo, em razão da maior espessura das paredes da membrana nas bactérias do tipo gram-positivo, constituída de peptídeos e ácidos tecóicos (Figura 2.6). As bactérias gram-positivas assumem uma cor púrpura ou azul quando fixadas com cristal violeta (corante), enquanto as bactérias gram-negativa são visualizadas com uma tonalidade rosa-avermelhada.

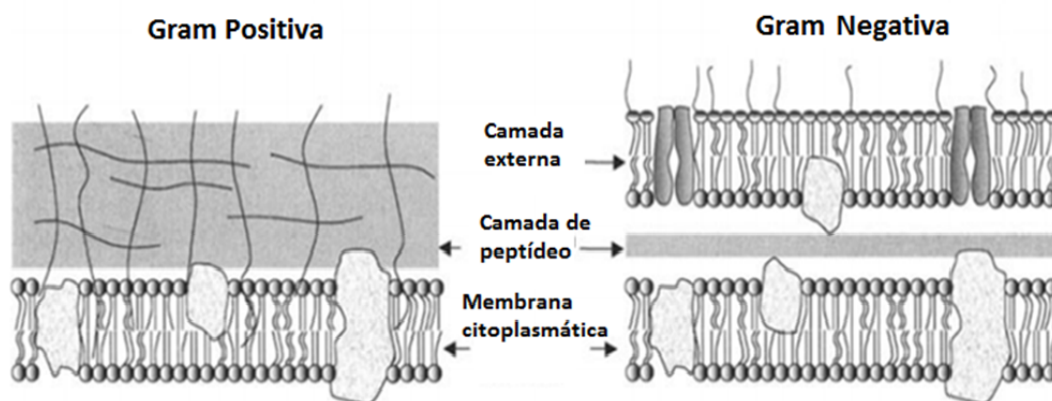


Figura 2.6 – Estruturas de membranas das bactérias tipo gram-positivo e gram-negativo - adaptado de (PAGAN; MAÑAS, 2006)

As bactérias *E. coli* e *S. aureus*, as quais são utilizadas nos estudos computacionais desta pesquisa, podem ser encontradas em sucos de frutas. A presença destes microrganismos em sucos de frutas é preocupante, considerando que estes patógenos já foram associados a vários surtos alimentares relacionados com sucos (RAYBAUDI-MASSILIA

et al., 2009). Apesar da característica ácida de sucos ser uma importante barreira para o crescimento de microrganismos, estas bactérias ainda conseguem sobreviver neste tipo de ambiente (ANEJA et al., 2014).

A bactéria *E. coli* é do tipo gram-negativa, sendo um microrganismo bastante comum. O seu habitat natural é o intestino dos seres humanos e de outros animais de sangue quente. Possui múltiplos flagelos dispostos em volta da célula. O tipo de *E. coli* O157:H7, de acordo com o “National Center for Disease Control and Prevention”, é a ameaça para os alimentos mais inquietante, relacionada com a saúde pública. Diferentemente de outros patógenos causadores de doenças veiculadas por alimentos (DVA), este tipo de *E. coli* é bastante crítica do ponto de vista de contaminação, já que uma quantidade microscópica pode causar enfermidade séria (FIGUEIREDO, 2003).

O microrganismo *S. aureus* é uma bactéria esférica gram-positiva, a qual ocorre em pares, em pequenas cadeias ou em cachos similares aos de uva. Existem no ar, na poeira, no esgoto, na água, nos alimentos ou equipamentos de processamento de alimentos, nos seres humanos e nos animais. Nos seres humanos, estão presentes nas vias nasais e na garganta, além do cabelo e na pele de 50% ou mais dos indivíduos saudáveis. Apesar dos manipuladores de alimentos serem, normalmente, as principais fontes de contaminação, os equipamentos e superfícies também podem ser fontes de contaminação. O crescimento microbiano ocorre em temperaturas entre 7 a 45 °C (FORSYTHE, 2013).

As geometrias típicas das bactérias *E. coli* e *S. aureus* são mostradas na Figura 2.7, na qual observa-se que a bactéria *E. coli* possui uma maior dimensão. Apesar de ter uma dimensão maior do que a bactéria *S. aureus* e ser do tipo gram-negativa, alguns estudos mostram que a bactéria *E. coli*, especificamente em meios ácidos, possui maior resistência ao tratamento do que a bactéria *S. aureus* (GARCÍA et al., 2005);(SALDAÑA et al., 2012).

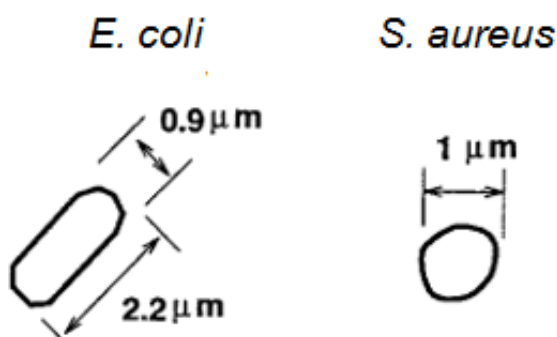


Figura 2.7 – Geometrias típicas para bactérias *E. coli* e *S. aureus* - adaptado de (QIN et al., 1998)

De acordo com a norma RDC 12 de 2001 da ANVISA (Agência Nacional de Vigilância Sanitária), para sucos pasteurizados, a concentração de coliformes fecais, tal

como a bactéria *E. coli*, deve ser no máximo de $10CFU/ml$ (BRASIL, 2001). A ANVISA não estabelece valores de *S. aureus* para sucos de frutas pasteurizados. De acordo com (RASHED et al., 2013), a concentração máxima recomendada de *S. aureus* para sucos de frutas é de $100CFU/ml$. Para uma determinada inativação microbiana ($\log_{10}S$) obtida nas simulações computacionais, a concentração final de uma bactéria pode ser calculada em função da concentração inicial da mesma no líquido. De posse da concentração final, uma avaliação do atendimento aos requisitos regulatórios deve ser realizada.

2.6 Câmaras de Tratamento

A câmara de tratamento é um componente chave do sistema de tratamento por pulsos de alta tensão, dentro da qual ocorre a distribuição de campo elétrico. Em geral, uma câmara de tratamento contém dois eletrodos fixados por um material isolante, formando um invólucro no qual o produto líquido a ser tratado é conduzido através de uma bomba. As configurações de eletrodos co-axiais, co-lineares e planos-paralelos são as mais utilizadas. De acordo com (PEÑA; ELEZ-MARTÍNEZ; MARTÍN-BELLOSO, 2011), uma distribuição de campo elétrico mais uniforme pode ser obtida usando a configuração de eletrodos plano-paralelos, quando inseridos numa câmara de tratamento que favoreça a distribuição uniforme gerada pelas placas retangulares, tal como mostrado na Figura 2.8. Porém, a baixa resistência resultante da configuração resulta numa circulação de corrente mais elevada no líquido e, conseqüentemente, num maior consumo energético. Por outro lado, embora os arranjos de eletrodos coaxiais e colineares mostrados tenham uma menor uniformidade de distribuição de campo elétrico, resultam numa maior resistência de carga, contribuindo para uma redução no valor da corrente.

Uma proposta de câmara de tratamento foi apresentada em (ALKHAFAJI; FARID, 2007), consistindo de dois eletrodos de aço inoxidável separados por um elemento isolador, conforme Figura 2.9. O produto líquido flui na região entre os eletrodos, através do orifício de $0.06cm^3$ existente entre os mesmos, no qual há uma concentração da distribuição de campo elétrico. A câmara foi projetada para tratamento de leite com vazão de $2.5cm^3/s$. O projeto desta câmara possibilitou a operação do sistema com elevada magnitude de campo elétrico ($49.6kV/cm$) e sem a ocorrência de disrupções dielétricas. Para operação do sistema com este nível de campo elétrico, foi necessário minimizar os efeitos térmicos mediante implementação de um sistema de resfriamento.

Um sistema multi-estágios de câmara de tratamento foi apresentado em (EL-HAG et al., 2013). Neste estudo, observou-se uma redução da resistência de carga do sistema, representada pela resistência da câmara de tratamento, para dois tipos de líquidos (água e suco de laranja), ao interligar estágios da câmara de tratamento eletricamente em paralelo. A alteração da forma de onda do pulso, devido à mudança da constante RC do circuito

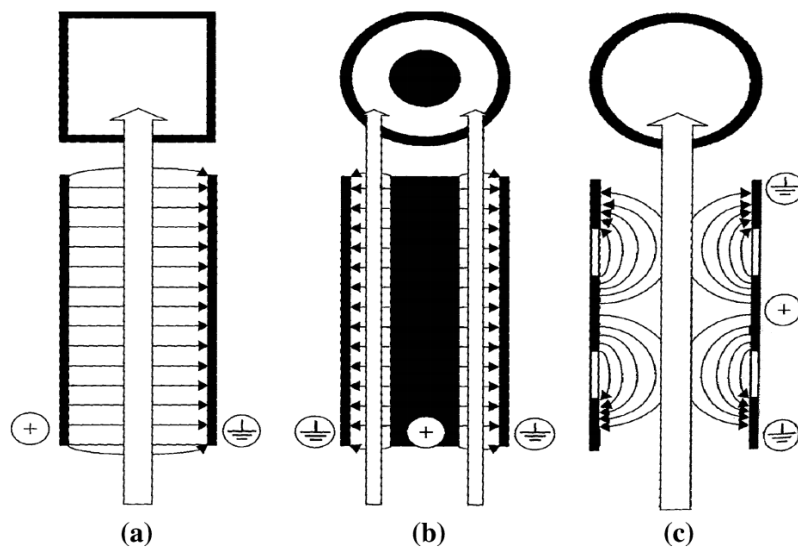


Figura 2.8 – Configurações típicas de câmaras de tratamento: a) Eletrodos Plano-paralelos; b) Arranjo coaxial; c) Arranjo colinear - adaptado de (TOEPFL; HEINZ; KNORR, 2005)

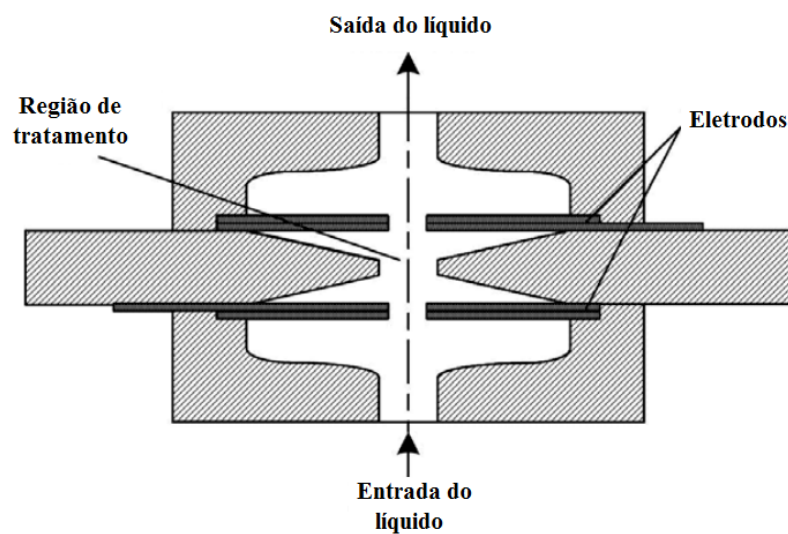


Figura 2.9 – Seção transversal da câmara de tratamento apresentada em (ALKHAFJI; FARID, 2007)

formado pelo equivalente elétrico do líquido na câmara de tratamento e conexões de interligação da fonte de alta tensão, além da redução da tensão efetiva aplicada sobre os eletrodos, devido à menor resistência de carga, impactaram na eficiência do tratamento. Uma redução da resistência de carga, à medida que mais estágios são conectados, ocasiona também uma elevação da corrente e, conseqüentemente, da energia dissipada no líquido e temperatura. Desta forma, para manter a eficiência do tratamento dentro de níveis aceitáveis, os autores concluíram que é necessário adequar os parâmetros da fonte de alta tensão (largura do pulso e/ou magnitude da tensão aplicada) à medida que mais estágios são conectados.

Em (GAD; JAYARAM, 2015), uma câmara de tratamento para processamento contínuo é apresentada em um estudo para avaliação do impacto do tratamento PEF nas características sensoriais de cerveja gaseificada (Figura 2.10). O campo elétrico de maior intensidade é gerado no *gap* de 1mm entre o eletrodo interno (esferoide) e os eletrodos externos (formato toroidal). A geometria desta câmara favorece a eliminação dos "efeitos das pontas", evitando intensificação de campo elétrico na região de tratamento e disrupções no líquido, além da uniformidade do campo elétrico entre eletrodos e redução de turbulência do fluido (escoamento laminar).

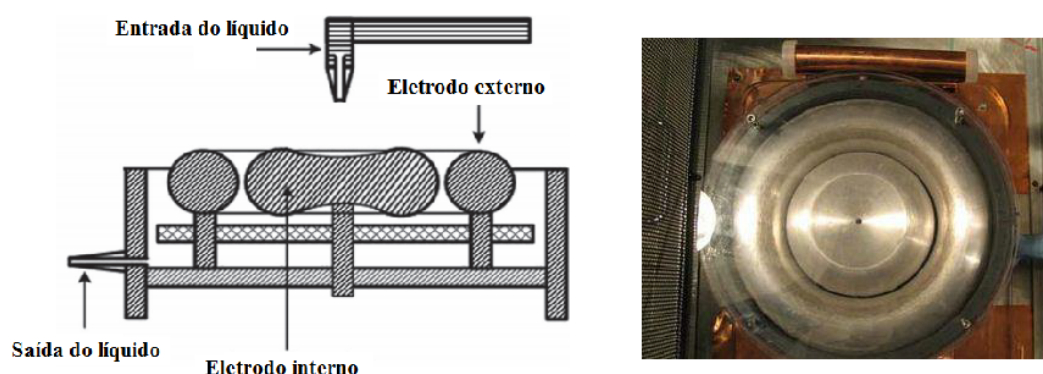


Figura 2.10 – Câmara de tratamento utilizada nos experimentos reportados em (GAD; JAYARAM, 2015) - a) Vista do esquemático em corte b) Visão superior da câmara de tratamento

Nas simulações computacionais deste estudo, inicialmente foram comparadas três configurações de eletrodos (coaxial, plano-paralelos e cilíndricos) com relação à eficiência do ponto de vista microbiológico e densidade de energia. A geometria coaxial foi selecionada para as simulações dinâmicas, considerando que apresentou o melhor desempenho nas simulações iniciais. Embora a distribuição de campo elétrico da geometria coaxial seja bem definida, sua distribuição de campo elétrico não é uniforme. Diante disso, a uniformidade do campo elétrico é calculada nos estudos computacionais de forma a analisar os aspectos dimensionais que favorecem uma distribuição mais uniforme possível. Na geometria coaxial utilizada, foram inseridos isoladores e anéis de equalização de forma a evitar intensificação de campo elétrico dentro do líquido. Maiores detalhes sobre a geometria são apresentados no Capítulo 4.

2.7 Simulações Numéricas

As simulações numéricas de um sistema de tratamento por pulsos de alta tensão constituem numa importante etapa de desenvolvimento que antecede aos experimentos (GERLACH et al., 2008). Um dos focos das simulações computacionais em sistemas PEF é a distribuição de campo elétrico dentro da câmara de tratamento, buscando uniformidade

e magnitudes suficientes para alcançar a eficiência requerida para o processo. A não uniformidade do campo elétrico pode dar origem a disrupções no líquido em regiões com elevação de campo elétrico e baixa eficiência do tratamento em zonas de enfraquecimento de campo elétrico. Além da distribuição de campo elétrico, a distribuição de temperatura é importante para monitoramento do aquecimento do líquido, de forma que o mesmo não atinja temperaturas acima da faixa especificada, o que pode comprometer as propriedades nutricionais e sensoriais do produto em tratamento.

Para aplicação de métodos numéricos, a primeira etapa consiste na formulação matemática do modelo, ou seja, da definição das equações que modelam o problema e das condições de contorno (FIALA et al., 2001). Estas equações são tipicamente diferenciais parciais, as quais são de complexidade relativa para serem resolvidas analiticamente. Desta forma, são discretizadas por métodos específicos para obtenção de uma solução numérica aproximada. Os métodos numéricos são capazes de prover resultados em pontos, elementos de superfície ou volumes dentro de uma malha, além da solução temporal.

Em linhas gerais, existem duas divisões de grupos de pesquisa que trabalham com simulações numéricas aplicadas ao tratamento de líquidos por pulsos de alta tensão. Um dos grupos tem foco em simulações de campo elétrico em câmaras de tratamento sem considerar a distribuição de temperatura e fluxo do fluido (GÓNGORA-NIETO et al., 2003); (TOEPFL; HEINZ; KNORR, 2007). O objetivo destas simulações é a obtenção de distribuição uniforme de campo elétrico, com magnitude suficiente para alcançar a inativação requerida para o processo. Um segundo grupo trabalha com simulações de um problema acoplado envolvendo distribuição de campo elétrico, fluxo do fluido e temperatura (FIALA et al., 2001); (LINDGREN et al., 2002). A principal proposta destas simulações, além da análise da distribuição de campo elétrico, é avaliar o aquecimento do líquido em função da distribuição de campo elétrico e da transferência de calor em virtude dos processos de condução e convecção térmica.

Em (GERLACH et al., 2008), é apresentada uma revisão da literatura sobre simulações numéricas aplicadas à tecnologia até o ano de 2008. Segundo os autores, as simulações numéricas podem ser utilizadas para obtenção de distribuições de campo elétrico mais uniformes através de técnicas de otimização aplicadas a ajustes de parâmetros dimensionais da câmara até o ponto de máxima uniformidade do campo elétrico.

Em (BUCKOW et al., 2010), uma análise acoplada da distribuição de campo elétrico, temperatura e dinâmica do fluido foi realizada através da modelagem 3D de um protótipo de câmara de tratamento colinear utilizando o software COMSOL^{MR}, em soluções de NaCl e de leite integral. As simulações numéricas mostraram que, para uma tensão aplicada de $22.2kV$, foi obtida uma distribuição relativamente uniforme de campo elétrico com intensidade de aproximadamente $30kV/cm$ entre os eletrodos medida a $0.25mm$ da parede do isolador, com picos na interface entre eletrodos e isoladores em torno de

$80kV/cm$ (Figura 2.11). A faixa de temperatura obtida no líquido foi de 25 a $80^{\circ}C$ para diferentes combinações das variáveis experimentais (tensão aplicada, número de pulsos e frequência), resultando em valores de temperatura fora da faixa normalmente utilizada para processamento por PEF.

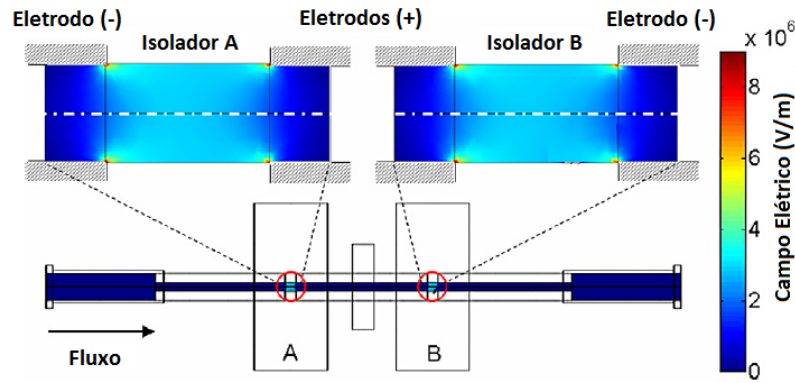


Figura 2.11 – Distribuição de campo elétrico dentro da câmara de tratamento com eletrodos na configuração colinear (inferior) e visão ampliada da distribuição de campo elétrico nas zonas de tratamentos (superior) – adaptado de (BUCKOW et al., 2010))

Em (SALDAÑA et al., 2010), distribuições de campo elétrico e temperatura foram obtidas pelo método dos elementos finitos utilizando o pacote comercial COMSOL^{MR}. A câmara de tratamento utilizada neste estudo consiste de um tubo de polipropileno contendo dois eletrodos cilíndricos paralelos de aço inoxidável, com área de superfície de $2.0cm^2$, comprimento de $4cm$ e *gap* de $0.25cm$. Um sistema de circulação de óleo foi implementado nos eletrodos de forma a manter o meio líquido com temperatura constante durante cada condição de ensaio. O meio foi submetido a diferentes temperaturas na faixa de 4 a $50^{\circ}C$. Foi observada uma boa uniformidade do campo elétrico dentro da câmara de tratamento, com valor médio na faixa de $30kV/cm$ e com ocorrência de picos de $56,8kV/cm$ na interface entre eletrodos e isoladores. As simulações numéricas mostraram ainda uma boa concordância de valores de temperatura na faixa especificada em comparação com os valores medidos experimentalmente através de termopares tipo K inseridos dentro da câmara.

Um algoritmo iterativo capaz de selecionar a melhor forma geométrica de um arranjo de eletrodos colineares, incluindo parâmetros do isolador e diâmetro do eletrodo interno, em função de um índice de desempenho denominado DPP (do inglês, *dimensionless performance parameter*), foi apresentado em (KNOERZER; BAUMANN; BUCKOW, 2012). O DPP é obtido para cada modelo geométrico criado no software COMSOL^{MR}, em função de uma ponderação de parâmetros, tais como, uniformidade e valor máximo do campo elétrico, dentre outros. Os resultados indicaram um melhor desempenho para

um valor de DPP de $3,54 \times 10^{-4}$, correspondendo a um diâmetro do eletrodo interno de $12mm$, diâmetro do isolador de $0.9mm$ e altura do isolador de $20mm$.

Em (HUANG et al., 2013), foram comparadas as uniformidades do campo elétrico e temperatura entre arranjos de eletrodos colinear e coaxial. As simulações numéricas indicaram que o arranjo com geometria coaxial de eletrodos apresentou uma distribuição de campo elétrico mais uniforme do que a geometria colinear, resultando em uma melhor eficiência de tratamento da geometria coaxial, para as mesmas condições de tratamento.

Em trabalho mais recente apresentado em (ZHU et al., 2017), os autores avaliaram câmaras de tratamento fabricadas com eletrodos miniaturizados (*microchips*), em que as distâncias entre eletrodos são reduzidas e valores relativamente baixos de tensão aplicada podem produzir magnitudes de campo elétrico de maior intensidade. A aplicação de tensão mais baixa evita contaminações no líquido pelo efeito de eletrólise próximo aos eletrodos e, conseqüentemente, alteração da composição da solução. As distribuições de campo elétrico para *microchips* com eletrodos planares (formato de pente) e plano-paralelos foram plotadas através do COMSOL^{MR}. A configuração com *microchip* utilizando eletrodos plano-paralelos com espaçamento de $100\mu m$ gerou um campo elétrico uniforme da ordem de $40kV/cm$ para uma tensão aplicada de $400V$. Após simulação, este arranjo foi avaliado experimentalmente, apresentando inativações microbianas em suco de mirtilo superiores a -4.5 com tempo de tratamento de $250\mu s$ para os microrganismos *E. coli*, *S. aureus* e *S. Cerevisiae*, mostrando-se mais eficiente do que a configuração com *microchips* utilizando eletrodos planares.

Com base nos trabalhos de simulações relacionados, percebe-se a relevância do tema, principalmente para o projeto de câmaras de tratamento para a tecnologia. Os estudos computacionais do presente trabalho visam, além da análise acoplada de distribuição de campo elétrico, temperatura e escoamento do fluido, incorporar a otimização do sistema PEF do ponto de vista de inativação microbiana e eficiência energética, com as devidas restrições em relação às variáveis em estudo, além de aplicar modelos de predição de inativação para cálculo da eficiência microbiológica. Os detalhes dos modelos computacionais utilizados nas simulações computacionais serão apresentados no Capítulo 4.

2.8 Modelos de Predição da Inativação Microbiana

O desenvolvimento de modelos matemáticos que estimam a inativação microbiana de microrganismos em função de parâmetros do sistema consiste numa importante etapa para o projeto de um sistema de tratamento PEF, possibilitando aos fabricantes de equipamentos preverem e controlarem a segurança e vida útil de produtos alimentícios durante a fase de projeto (ALVAREZ et al., 2003). A taxa de sobrevivência de microrganismos S é dada

pela razão entre a concentração final (N_f) e a concentração inicial de microrganismos (N_i), conforme Equação 2.2,

$$S = \frac{N_f}{N_i} \quad (2.2)$$

O primeiro modelo matemático relacionando à inativação microbiana de microrganismos ($\log_{10}S$ ou $\ln S$) em função do campo elétrico aplicado foi proposto em (HÜLSHEGER; NIEMANN, 1980). Os primeiros estudos foram realizados com a bactéria *E. coli* com concentração inicial de $10^6 UFC/ml$ e tempo de incubação de 16 horas, inseridas em uma solução de eletrólitos $Na_2S_2O_3$. O composto foi submetido a um campo elétrico de 8 a $20kV/cm$ e tempo de tratamento de 36 a $1080us$. O modelo baseia-se na dependência da taxa de sobrevivência de microrganismos S (razão de células vivas depois e antes da aplicação do tratamento) em relação ao campo elétrico aplicado, de acordo com a seguinte expressão: (HÜLSHEGER; NIEMANN, 1980),

$$\ln(S) = -b_e(E - E_c) \quad (2.3)$$

onde b_e é o coeficiente que representa a inclinação da curva de $\ln(S)$ em função do campo elétrico aplicado, E é o módulo do campo elétrico aplicado e E_c é o campo elétrico crítico específico para cada microrganismo.

Em 1981, *Hulsheger e Niemann* em conjunto com outros pesquisadores, propuseram um modelo que relaciona o tempo de tratamento t com S , conforme Equação 2.4 (HÜLSHEGER; POTEL; NIEMANN, 1981):

$$\ln(S) = -b_t \ln\left(\frac{t}{t_c}\right), \quad (2.4)$$

onde b_t é o coeficiente que representa a inclinação da curva de $\ln(S)$ em função do tempo de tratamento, t é o tempo de tratamento e t_c é o tempo de tratamento crítico específico para cada microrganismo.

A Equação completa que representa o modelo de predição proposto por *Hülshager e Niemann*, obtida através das Equações 2.3 e 2.4, pode ser expressa por (HÜLSHEGER; POTEL; NIEMANN, 1983),

$$S = \left(\frac{t}{t_c}\right)^{\frac{-(E-E_c)}{k_c}} \quad (2.5)$$

onde: S representa a taxa de sobrevivência, t é o tempo de tratamento, E é o módulo do campo elétrico aplicado, t_c é o tempo de tratamento crítico, E_c é o campo elétrico crítico

e k_c é um fator específico para cada microrganismo, resultante da regressão de dados experimentais.

O tempo de tratamento crítico t_c , o campo elétrico crítico E_c e o fator k_c representam a sensibilidade do microrganismo ao tratamento, sendo que valores mais baixos destes parâmetros indicam uma menor resistência ao tratamento.

Em (PELEG, 1995), foi proposto um novo modelo de predição baseado na equação de distribuição de Fermi-Dirac. Este modelo relaciona a taxa de sobrevivência com parâmetros que refletem a resistência do microrganismo ao tratamento, os quais variam em função do número de pulsos, considerando uma mesma duração do pulso. A Equação (2.6) expressa o modelo de Peleg:

$$S = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_{cp}(n)}{k_{cp}(n)}}}, \quad (2.6)$$

onde: S representa a taxa de sobrevivência, E é o módulo do campo elétrico aplicado, n é o número de pulsos, $E_{cp}(n)$ é o campo elétrico crítico em função do número de pulsos e $k_{cp}(n)$ representa a inclinação da curva S x E em função do número de pulsos.

No modelo de Peleg, um baixo valor do parâmetro $k_{cp}(n)$ resulta em um declínio mais rápido da inativação microbiana em relação ao campo elétrico aplicado. O valor do campo crítico $E_c(n)$ diminui à medida que o número de pulsos aumenta, indicando uma menor resistência ao tratamento (HUANG; WANG, 2009).

Outro modelo aplicado para prever a inativação microbiana utiliza a distribuição de probabilidade de *Weibull*, o qual é expresso através da Equação (2.7) (HUANG et al., 2012); (CEBRIÁN et al., 2008). O modelo de *Weibull* estima a inativação microbiana através de dois parâmetros, denominados parâmetro escalar (δ) and parâmetro de forma (β). O parâmetro escalar representa o tempo no qual a inativação microbiana $\log_{10}S(t) = -1$, ou seja, uma redução de 90% da população inicial do microrganismo em análise. O parâmetro β representa a forma da curva: $\beta < 1$ corresponde à concavidade para cima, $\beta > 1$ corresponde à concavidade para baixo e $\beta = 1$ à curva linear,

$$\log_{10}S(t) = - \left(\frac{t}{\delta} \right)^\beta \quad (2.7)$$

onde S representa a taxa de sobrevivência e t é o tempo de tratamento

O parâmetro δ pode ser escrito em função da intensidade do campo elétrico utilizando modelos secundários, obtidos através de regressão de dados experimentais. A Equação 2.8 representa a forma geral do polinômio de terceira ordem, o qual foi aplicado no ajuste dos dados experimentais reportados em (HUANG et al., 2014) para os

microrganismos *S. aureus* and *E. coli* em sucos de uva,

$$\log_{10}(\delta(E)) = A_0 + A_1E + A_2E^2 + A_3E^3 \quad (2.8)$$

onde A_0, A_1, A_2, A_3 são os coeficientes do polinômio e E o módulo do campo elétrico [Vm^{-1}].

Substituindo a expressão polinomial de δ , obtida a partir de um modelo secundário, e utilizando o valor médio do coeficiente de forma (β_{av}):

$$\log_{10}S(t, E) = - \left[\frac{t}{10(A_0 + A_1E + A_2E^2 + A_3E^3)} \right]^{\beta_{av}}, \quad (2.9)$$

O modelo de *Weibull* também pode ser expresso na forma exponencial, conforme apresentado na Equação 2.10 (SINGH et al., 2016),

$$S(t) = e^{\left(-\frac{t}{\delta'}\right)^{\beta'}}, \quad (2.10)$$

onde: S representa a taxa de sobrevivência, t é o tempo de tratamento, δ' representa o tempo necessário para reduzir a 90% a população inicial de microrganismos e β' é o coeficiente de forma do modelo de *Weibull*, o qual representa a concavidade da curva $\ln(S)$ x t .

O modelo de *Weibull* tem sido aplicado para descrever curvas de inativação microbiana para tratamentos térmicos e com a tecnologia PEF. Este modelo apresenta resultados mais precisos em faixas de inativação microbiana maior do que $5\log_{10}$ ciclos em relação a outros modelos, tais como os modelos de *Hulsheger* e *Peleg*, os quais geralmente apresentam melhores resultados em faixas de inativação microbiana de poucos $\log_{10}$ ciclos de redução (PEÑA; ELEZ-MARTÍNEZ; MARTÍN-BELLOSO, 2011).

2.9 Estado da Arte da Tecnologia

A tecnologia PEF é promissora para aplicação no tratamento de produtos líquidos, apresentando resultados de inativação microbiana em níveis adequados para a segurança alimentar, além de preservar os atributos nutritivos e sensoriais dos produtos em tratamento. Apesar do potencial da tecnologia para aplicações industriais, o desenvolvimento ainda enfrenta alguns desafios, tais como: a necessidade de aumentar a eficiência na eliminação de alguns microrganismos de maior resistência ao tratamento, tais como as bactérias do tipo gram-positiva e bactérias do tipo *spore*, falta de padronização dos experimentos dificulta a formação de uma base científica consistente e a criação de protocolos para operação dos equipamentos e restrição para aplicação em líquidos de elevada condutividade.

O elevado investimento inicial para aquisição de um sistema PEF também é um fator que dificulta a comercialização. Um equipamento com capacidade para 1000L/h, por exemplo, tem um custo estimado de \$500.000 (KUMAR; PATEL; KUMAR, 2015). O investimento inicial em equipamentos PEF pode ser reduzido num futuro próximo através do desenvolvimento de fontes de alta tensão de menor custo capazes de gerar pulsos de alta frequência, o que aumenta a capacidade dos sistemas, e projeto de câmaras de tratamento mais eficientes (SAMPEDRO et al., 2014). Por outro lado, a implementação de um sistema PEF pode ser viável, considerando sua maior eficiência energética em relação ao método de pasteurização convencional. Em estudos reportados em (RODRIGUEZ-GONZALEZ et al., 2015), por exemplo, o consumo energético do método PEF foi de aproximadamente 30% em relação ao método térmico e 13% em relação ao método de processamento por alta pressão.

O uso combinado do tratamento com aplicação de pulsos elétricos de alta tensão com outras tecnologias tem se mostrado uma tendência. A utilização em conjunto com outros tratamentos emergentes não térmicos (alta pressão hidrostática, radiação ultravioleta e outros) pode potencializar a eliminação de microrganismos. Além disso, a utilização simultânea com o tratamento térmico convencional permite a redução da necessidade de calor aplicado, minimizando seus efeitos indesejáveis (MARTÍN-BELLOSO; SOBRINO-LÓPEZ, 2011).

Embora o uso da tecnologia ainda não seja em grande escala, há várias empresas atuando no seu desenvolvimento e aprimoramento dos equipamentos, sendo que as empresas Elea e DTI, ambas na Alemanha, comercializaram cerca de 2/3 dos equipamentos atualmente em operação (KEMPKE; SIMPSON; ROTH, 2016). A capacidade dos equipamentos varia de 50 (uso laboratorial) a 10.000L/hora. Aproximadamente 100 sistemas PEF estavam operando em todo o mundo em 2015, incluindo equipamentos industriais e para uso em pesquisa e desenvolvimento (KEMPKE, 2017).

Mediante o interesse da comunidade científica sobre o tema, considerando principalmente a característica de preservação das propriedades nutricionais do produto em tratamento, o desenvolvimento de ferramentas computacionais para o projeto de sistemas PEF e o investimento de empresas no projeto e fabricação de equipamentos, a tecnologia PEF pode, a partir de uma redução de custos em relação aos processos térmicos convencionais, se tornar bastante competitiva num futuro próximo.

2.10 Considerações Finais

A pesquisa bibliográfica sobre o tema mostrou os aspectos fundamentais que servem para um melhor entendimento de um processo de tratamento por PEF, apresentando o fenômeno físico da eletroporação, com base na tensão induzida na membrana celular, os

modelos de predição reportados na literatura e os fatores mais impactantes na eficiência, além de relevantes estudos sobre projetos de câmaras de tratamento e simulações numéricas, além do estado da arte sobre a tecnologia.

Além da intensidade do campo elétrico e do tempo de tratamento, observa-se que outros parâmetros podem impactar de forma significativa na eficiência do tratamento. A compreensão sobre a influência destes fatores é essencial para as investigações, considerando que os mesmos podem explicar eventuais desvios significativos entre os resultados numéricos e experimentais, contribuindo para o refinamento de modelos computacionais.

Os estudos de simulações numéricas mencionados na revisão bibliográfica mostram a relevância das análises de distribuição de campo elétrico, associadas com a análise de temperatura e de fluxo do líquido, para o projeto de câmaras de tratamento e otimização de variáveis dimensionais das mesmas. Dentro deste contexto, os estudos apresentados nesta tese visam agregar para as pesquisas computacionais no sentido de possibilitar uma análise simultânea de dois parâmetros de interesse em um sistema de tratamento PEF, ou seja, a inativação microbiana e a densidade de energia, dando ao projetista opções de ajustes de projeto de acordo com as especificidades de cada processo e/ou produto em tratamento.

3 Fundamentação Teórica

3.1 Introdução

Este capítulo aborda os fundamentos teóricos dos métodos e técnicas aplicados ao trabalho, apresentando, em síntese, os principais conceitos e formulações matemáticas utilizados aos modelos computacionais. Inicialmente, é abordado o planejamento experimental aplicado nas simulações computacionais. A seguir, é apresentado o método dos elementos finitos, utilizado para cálculo da distribuição de campo elétrico. Finalmente, são apresentados os conceitos gerais sobre otimização multiobjetivo, com ênfase no algoritmo NSGA-II, aplicado aos objetivos conflitantes relacionados com a eficiência do sistema (inativação microbiana e densidade de energia).

3.2 Planejamento Experimental

Um planejamento experimental, do inglês *DOE (Design of experiments)*, é uma série de testes nos quais alterações são realizadas nas variáveis de entrada para investigação dos efeitos nas variáveis de resposta, baseando-se em uma análise estatística. A análise estatística dos dados experimentais é realizada para determinar quais variáveis e interações influenciam em uma ou mais variáveis de resposta ([TELFORD, 2007](#)). O planejamento experimental tem se mostrado uma ferramenta muito útil em projetos e análise de sistemas industriais, sendo aplicado para processos físicos ou em simulações computacionais ([TELFORD, 2007](#)).

O processo ou sistema a ser investigado pode ser representado pelo modelo da Figura 3.1. De acordo com ([MONTGOMERY, 2008](#)), experimentos são utilizados para estudar processos e sistemas. O processo pode ser visualizado como uma combinação de operações, métodos, pessoas e outros recursos que transformam as variáveis de entrada em uma saída, a qual possui uma ou mais variáveis de resposta. Os fatores podem ser controláveis ou não controláveis. Em um sistema de tratamento por PEF, um exemplo de fator controlável é a temperatura, a qual pode ser controlada pela ativação de um sistema de resfriamento ou pela limitação do tempo de tratamento, de forma a manter a temperatura do líquido dentro de uma faixa especificada. Como exemplo de fator não controlável, pode-se citar a distribuição de microrganismos dentro do líquido em tratamento.

A metodologia de planejamento experimental consiste numa série de etapas que devem ser executadas para que os resultados obtidos tenham o nível de confiabilidade requerido para a experimentação.

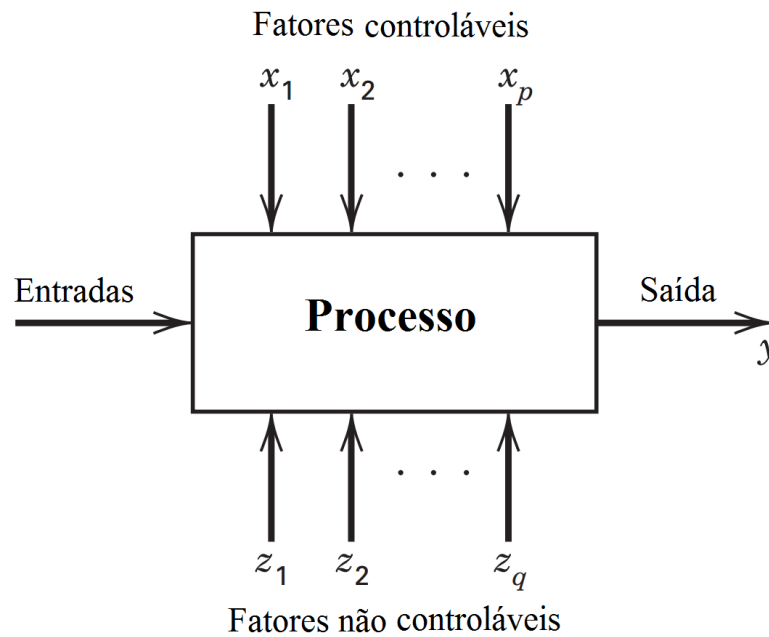


Figura 3.1 – Modelo geral de um processo - Adaptado de (MONTGOMERY, 2008)

Em (KAYE; FRANGOU, 1998), é descrito um roteiro para elaboração de um planejamento experimental. As primeiras etapas de um planejamento de experimentos consistem em descrever o objetivo do experimento, a partir do reconhecimento e descrição do problema, definir os fatores/níveis e selecionar as variáveis de resposta. Após escolha das variáveis de resposta, deve-se definir uma técnica de planejamento experimental com o objetivo de estimar a influência das diversas variáveis experimentais nos resultados e montar a matriz experimental. A seguir, ocorre a preparação do experimento, com a avaliação de disponibilidade de recursos, ambiente, etc. O planejamento é executado de acordo com as diretrizes definidas nas etapas anteriores e, a seguir, métodos estatísticos são empregados para análise e interpretação dos resultados. Caso necessário, uma reavaliação dos fatores e níveis pode ser realizada em função dos resultados obtidos. Após análise dos dados, o experimento deve propiciar conclusões práticas sobre os resultados. A Figura 3.2 apresenta o fluxograma geral de um experimento.

Dentre os diversos tipos de planejamento experimental, os sistemas de planejamento fatorial destacam-se, pois permitem avaliar simultaneamente o efeito de um grande número de variáveis, a partir de um número reduzido de ensaios experimentais, quando comparados com o sistema clássico de processos univariados, os quais negligenciam a correlação entre as variáveis (PERALTA-ZAMORA; MORAIS; NAGATA, 2005).

Em geral, o planejamento experimental é representado por b^k , onde k representa o número de fatores e b o número de níveis escolhidos. Em um planejamento fatorial, se a influência de k fatores é investigada em dois níveis, o planejamento consistirá de 2^k experimentos (LUNDSTEDT et al., 1998).

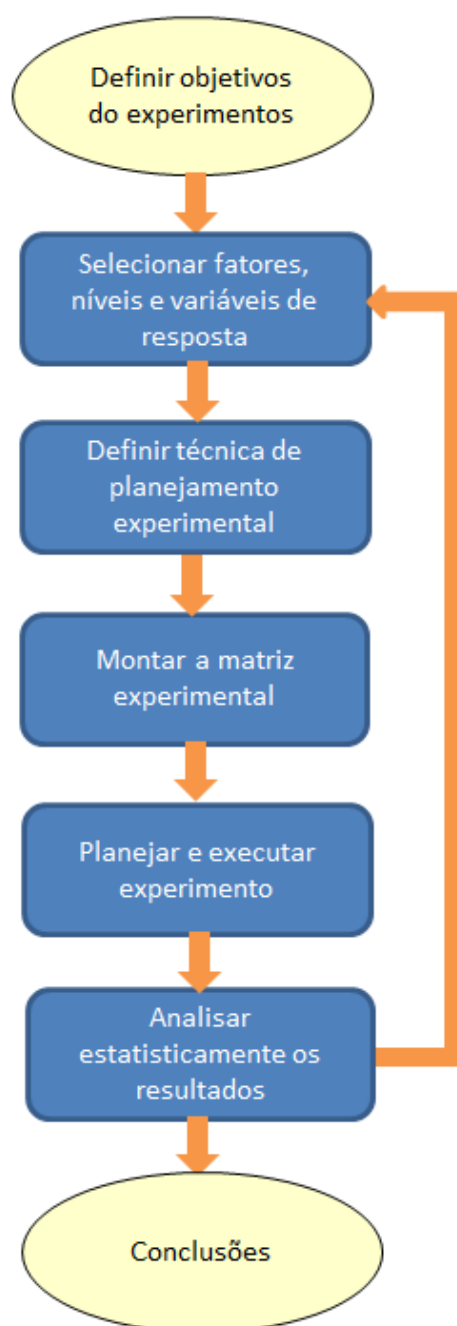


Figura 3.2 – Fluxograma geral de um planejamento experimental - Adaptado de (KAYE; FRANGOU, 1998)

Nas simulações numéricas com sistema estático, é aplicado planejamento fatorial 3^3 , consistindo de três variáveis e três níveis, englobando parâmetros elétricos e dimensionais, sendo utilizado para gerar resultados de inativação microbiana e densidade de energia. As variáveis elétricas consideradas para o estudo são a magnitude da fonte de alta tensão e o tempo de tratamento. As variáveis dimensionais foram definidas para cada arranjo de eletrodos. Nas simulações com sistemas dinâmicos, é aplicado planejamento fatorial 5^2 , com duas variáveis e cinco níveis. Neste caso, a magnitude do campo elétrico foi utilizada como variável de resposta e as variáveis consideradas foram a magnitude da fonte e o raio

interno da geometria coaxial, sendo as grandezas que impactam na distribuição de campo elétrico. Em ambos os casos, os resultados da matriz experimental foram obtidos através de simulações numéricas.

A seguir, é apresentada uma visão geral do método numérico de elementos finitos, o qual é utilizado para o cálculo de campos físicos (campo elétrico, temperatura e escoamento do fluido) dentro da câmara de tratamento.

3.3 Métodos Numéricos

Na maioria dos modelos matemáticos contínuos, a resolução analítica costuma oferecer grandes dificuldades. A solução é tratar estes problemas através de métodos de discretização envolvendo aproximações com um modelo matemático adequado em que a solução se aproxima da solução exata à medida que a discretização do domínio aumenta (ZIENKIEWICZ; TAYLOR; ZHU, 2005) (BATHE, 2006).

Existem vários métodos que buscam soluções aproximadas a partir de subdomínios, dentre os quais podemos citar: método das diferenças finitas, o método dos elementos finitos, o método dos elementos de contorno e diversos métodos sem malha. Dentre os métodos existentes para resolução de problemas eletromagnéticos, o método dos elementos finitos tem adquirido grande importância desde sua criação na década de 60, devido a duas principais vantagens sobre os demais métodos numéricos: flexibilidade do método na modelagem de problemas complexos e elevada precisão nos resultados, considerando uma malha apropriada para a discretização (REDDY, 1993).

3.3.1 Método dos Elementos Finitos

O método dos elementos finitos é uma técnica numérica aproximada para resolução de problemas descritos por equações diferenciais parciais, com determinadas condições de contorno. A geometria do problema é subdividida em partes menores, denominadas de elementos finitos, conectados entre si através de pontos nodais. Este método pode ser aplicado para análise de problemas de campo, tais como: condução de calor, campo elétrico, escoamento de fluidos, campos gravitacionais, campos magnetostáticos, etc.

Esta seção apresenta os fundamentos do método dos elementos finitos, baseado na aplicação do método dos resíduos ponderados. Os conceitos abordados foram aplicados na implementação do código em MatLab^{MR} (código fonte disponível no apêndice B) nas simulações com câmaras estáticas para a determinação da distribuição de campo elétrico em 3D, realizado a partir do cálculo dos potenciais nos nós de cada elemento tetraedro da malha de elementos finitos. O software COMSOL^{MR}, utilizado nas simulações dinâmicas, também utiliza o método dos elementos finitos para resolver o problema multifísico de distribuição de campo elétrico, temperatura e escoamento do fluido. O acoplamento entre

os campos físicos analisados depende de uma definição de uma malha adequada, de forma a atender aos requisitos de convergência para a busca de uma solução mais exata, ponderando com o esforço computacional, além das definições de condições de contorno para cada física, compatíveis com o problema acoplado em questão. Os detalhes referentes ao pré-processamento do método (geometria, malha e condições de contorno) serão discutidas com mais detalhes no Capítulo 4.

3.3.2 A Equação de Laplace para Meios Condutivos

Inicialmente, será obtida a Equação de Laplace para meios condutivos, a qual será discretizada pelo método dos elementos finitos para cálculo dos potenciais da malha.

O desenvolvimento da equação de Laplace descrito nesta seção é baseado em (MACEDO, 1988). A Equação (3.1) relaciona o campo elétrico com a variação temporal do campo magnético, sendo uma das equações de Maxwell, representando a forma diferencial da lei de Faraday.

De acordo com as equações de Maxwell, a forma diferencial da lei de Faraday é expressa por:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.1)$$

No caso de campos estacionários, considerando que o transitório do pulso aplicado não tem influência significativa no modelo, a Equação (3.1) pode ser expressa por:

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad (3.2)$$

A partir da Equação (3.1), pode-se introduzir um potencial elétrico escalar V , tal que:

$$\mathbf{E} = -\nabla V \quad (3.3)$$

Em meios condutivos, a densidade de corrente $\mathbf{J}$ está relacionada com o campo elétrico $\mathbf{E}$ através da Equação (3.4), conhecida como lei de Ohm sob a forma local, sendo uma das equações constitutivas de Maxwell:

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (3.4)$$

onde σ representa a condutividade elétrica do meio

Substituindo a Equação (3.3) na equação (3.4), tem-se que:

$$\mathbf{J} = -\sigma(\nabla V), \quad (3.5)$$

onde σ representa a condutividade elétrica do meio

A equação de continuidade, derivada das equações de Maxwell, relaciona a intensidade de corrente e densidade de carga. Considerando que a variação temporal da densidade de carga volumétrica $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ seja igual à zero no domínio, a mesma pode ser expressa por:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (3.6)$$

Substituindo a Equação (3.5) na Equação (3.6), temos a equação de Laplace para meios condutivos, a qual é expressa da seguinte forma:

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla V) = 0 \quad (3.7)$$

3.3.3 Aplicação do Método dos Resíduos Ponderados

Segundo (BASTOS; SADOWSKI, 2003), o método dos resíduos ponderados aplicado ao problema consiste em encontrar uma solução aproximada para a Equação (3.7), a partir do cálculo de um resíduo mínimo, conforme segue:

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla V) = R, \quad (3.8)$$

onde R representa o resíduo gerado pela solução não exata da equação.

Quanto mais o resíduo se aproxima de zero, mais a solução pelo método dos elementos finitos se aproxima da solução analítica. Para que o resíduo se aproxime de zero, é aplicada a função peso ω ao resíduo gerado sobre todos os elementos do domínio Ω , conforme Equação (3.9):

$$\int_{\Omega} \omega R d\Omega \quad (3.9)$$

Substituindo o resíduo R pela Equação (3.8), tem-se que:

$$\int_{\Omega} \omega (\nabla \cdot (\sigma \nabla V)) d\Omega \quad (3.10)$$

Desenvolvendo a propriedade do divergente $\nabla \cdot (U \mathbf{A}) = U \nabla \cdot \mathbf{A} + \nabla \cdot U \mathbf{A}$, pode-se escrever:

$$U \nabla \cdot \mathbf{A} = \nabla \cdot (U \mathbf{A}) - \nabla \cdot U \mathbf{A} \quad (3.11)$$

$$\int_{\Omega} U \nabla \cdot \mathbf{A} d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (U \mathbf{A}) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla U \cdot \mathbf{A} d\Omega \quad (3.12)$$

Aplicando o teorema da divergência no primeiro termo à direita da Equação (3.12), tem-se que:

$$\int_{\Omega} U \nabla \cdot \mathbf{A} d\Omega = \oint_S (U \mathbf{A}) ds - \int_{\Omega} \nabla U \cdot \mathbf{A} d\Omega, \quad (3.13)$$

onde S é a superfície que contém o domínio Ω .

Fazendo $U = \omega$ e $\mathbf{A} = \sigma \nabla V$ na Equação (3.10), a mesma pode ser escrita de acordo com a Equação (3.14), conforme segue:

$$\int_{\Omega} \omega (\nabla \cdot (\sigma \nabla V)) d\Omega = \oint_S (\omega \sigma \nabla V) ds - \int_{\Omega} \sigma \nabla V \cdot \nabla \omega d\Omega \quad (3.14)$$

O primeiro termo é anulado, considerando que a função peso ω se anula nos pontos em que as condições de contorno de Dirichlet são definidas. A equação resultante é denominada forma fraca do problema, possuindo somente derivadas de primeira ordem, a qual possui solução numérica mais fácil do que a equação de Laplace para meios condutivos (3.7), sendo expressa por:

$$\int_{\Omega} \sigma \nabla V \cdot \nabla \omega d\Omega = 0 \quad (3.15)$$

A discretização da forma fraca do problema em 3D para cálculo dos potenciais nos nós dos elementos volumétricos é realizada a partir de funções de interpolação aplicadas aos elementos tetraedros da malha e técnicas para montagem da matriz global do sistema.

A partir do cálculo dos potenciais nos nós, no algoritmo de elementos finitos, o campo elétrico em cada elemento é calculado mediante uso de funções de interpolação nodais aplicadas aos potenciais nos vértices de cada tetraedro e do Jacobiano das coordenadas de cada elemento, conforme a Equação (3.16). Neste estudo, foi adotado valor de campo elétrico máximo $50kV/cm$, de forma a evitar disrupções no líquido em tratamento,

$$\mathbf{E} = -[(\mathbf{J}^{-1}) \nabla N_i] \phi, \quad (3.16)$$

onde $\mathbf{E}$ é o vetor campo elétrico em cada elemento; $\mathbf{J}$ é o Jacobiano das coordenadas (x,y,z) de cada elemento; N_i são as i funções de interpolação nos nós de cada tetraedro e ϕ é o vetor de potenciais nos nós de cada elemento volumétrico.

A próxima seção aborda a teoria dos algoritmos evolutivos multiobjetivos, a qual é utilizada para geração do conjunto de soluções para o problema.

3.4 Otimização Multiobjetivo

Existem muitos problemas do mundo real, incluindo problemas eletromagnéticos, que envolvem a otimização simultânea de múltiplos objetivos conflitantes, os quais podem ser tratados por meio da otimização multiobjetivo. Ao invés de uma única solução, tal como ocorre nos problemas mono-objetivo, na otimização multiobjetivo tem-se como resultado um conjunto de soluções que reflete um compromisso entre os objetivos. Este grupo de soluções é denominado “Pareto-ótimo” (MIETTINEN, 2012).

Nos estudos computacionais deste trabalho, a solução de problema eletromagnético é acoplada com as funções de inativação microbiana e densidade de energia de um sistema PEF, as quais representam as funções objetivo do problema de otimização. Através do algoritmo de otimização multiobjetivo, busca-se um compromisso entre estas funções aplicadas a diferentes estudos de caso, com restrições com relação às variáveis de projeto. Nas próximas seções, é apresentada uma visão geral da otimização multiobjetivo e os métodos de busca por soluções, com ênfase no algoritmo NSGA-II, o qual foi utilizado no modelo computacional.

3.4.1 O Problema Multiobjetivo

Um problema de otimização multiobjetivo (MOOP, do inglês *Multi-Objective Optimization Problem*) possui um conjunto de funções objetivo a serem minimizadas ou maximizadas, além de restrições que devem ser satisfeitas para que uma solução seja factível para o problema. A formulação matemática geral de um problema multiobjetivo de minimização é dada, sem perda de generalidade, pela Equação (3.17) (DEB, 2001):

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) = f_1(\mathbf{x}), \dots, f_N(\mathbf{x}) \\ \text{restrito a} \quad & \begin{cases} g_i(\mathbf{x}) \geq 0, i = 1, 2, \dots, NR_{des} \\ h_j(\mathbf{x}) = 0, j = 1, 2, \dots, NR_{igu} \\ \mathbf{x}_k^{inf} \leq \mathbf{x}_i \leq \mathbf{x}_i^{sup}, k = 1, 2, \dots, n \end{cases} \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde $f(\mathbf{x})$ representa o conjunto de N funções objetivo para minimização; $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ é um vetor de n variáveis de decisão; $g_i(x)$ e $h_j(x)$ são as NR_{des} restrições de desigualdade e NR_{igu} restrições de igualdade, respectivamente.

Em um problema de otimização multiobjetivo, o espaço de parâmetros (variáveis de decisão ou projeto) é mapeado no espaço de objetivos, conforme mostrado na Figura 3.3. Ressaltando que, no processo de mapeamento, diferentes vetores de decisão podem resultar em uma mesma solução no espaço de objetivos. Nos estudos computacionais, as seguintes variáveis de decisão são analisadas: o raio do eletrodo da geometria analisada

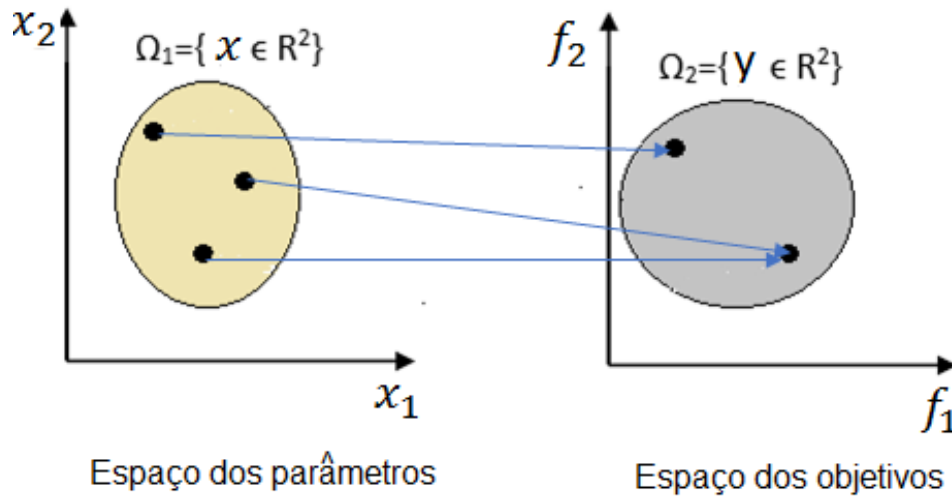


Figura 3.3 – Mapeamento dos parâmetros no espaço dos objetivos (Fonte: próprio autor)

(coaxial), a tensão aplicada e o tempo de tratamento. As funções objetivo são a inativação microbiana e a densidade de energia (objetivos conflitantes de um sistema PEF).

A Figura 3.4 apresenta uma curva contendo um conjunto de soluções Pareto-ótimas para determinado problema de minimização de duas funções conflitantes. A região abaixo da curva contém as soluções não factíveis, ou seja, aquelas soluções que não satisfazem às restrições do problema (soluções inexistentes). As soluções acima da curva correspondem às soluções factíveis, porém dominadas pelas soluções da fronteira de Pareto, as quais representam soluções cujos valores são menores para os dois objetivos quando comparadas às soluções para os pontos acima da curva.

3.4.2 Algoritmos Evolutivos Multiobjetivos

Um algoritmo evolutivo pode ser definido como a aplicação sucessiva de operações de cruzamento, mutação e seleção sobre um conjunto de soluções-candidatas do problema (população) (TAKAHASHI, 2011). O algoritmo é iniciado com um conjunto de possíveis soluções do problema (indivíduos), formados por variáveis do problema, constituindo uma população. Essa população é criada aleatoriamente dentro dos limites pré-estabelecidos. As soluções da primeira população são utilizadas para formar, por meio de operadores evolutivos (cruzamento e mutação), uma nova população, motivados pela expectativa de que a mesma seja melhor do que a população anterior. As melhores soluções, mesmo que provisórias, são selecionadas probabilisticamente por um operador de seleção, através da avaliação de uma função de minimização ou maximização, a qual avalia a “qualidade” da solução em relação ao problema, sendo que as melhores soluções terão mais chances de serem selecionadas mediante aplicação dos operadores evolutivos. O processo é repetido até que algum critério de convergência seja satisfeito (HAUPT; HAUPT, 2004);(ÁVILA et al., 2006).

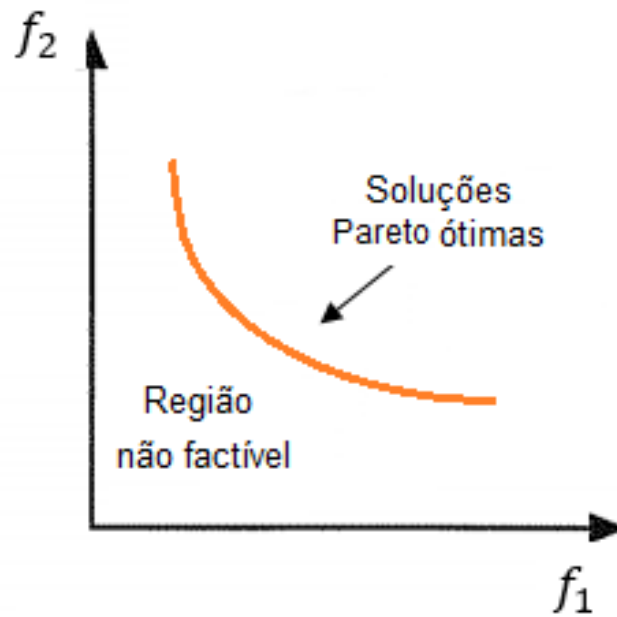


Figura 3.4 – Curva de Pareto para problema de minimização de duas funções (Fonte: próprio autor)

Uma das características que fazem os algoritmos evolutivos serem amplamente utilizados em problemas de otimização multiobjetivo é que as populações neste caso são processadas em cada iteração (ou geração). Desta forma, algumas alterações no algoritmo evolutivo básico descrito anteriormente são realizadas de forma a obter um conjunto de soluções Pareto estimadas, eliminando o uso repetitivo de métodos de otimização mono-objetivo (DEB, 2001). Segundo (TAKAHASHI, 2011), os algoritmos evolutivos incorporam operadores que exploram as "propriedades de grupo" das estimativas do conjunto Pareto-ótimo, o que torna potencialmente aplicáveis aos problemas multiobjetivo. Pelo fato de trabalhar com populações, estes métodos são aplicáveis a problemas com funções não convexas. Além disso, não necessitam de informação sobre gradientes das funções e, portanto, não apresentam dificuldades em relação à não diferenciabilidade dos problemas (GOLDBERG; HOLLAND, 1988). As vantagens citadas determinaram a opção pela utilização de um algoritmo evolutivo nos estudos computacionais. Dentre os inúmeros algoritmos evolutivos multiobjetivos, pode-se destacar: VEGA (Vector Evaluated Genetic Algorithm) (SCHAFER, 1985), MOGA (Multiobjective Genetic Algorithm) (FONSECA; FLEMING et al., 1993), NPGA (Niche Pareto Genetic Algorithm) (HORN; NAFPLIOTIS; GOLDBERG, 1994), NSGA (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm) (SRINIVAS; DEB, 1995), SPEA (Strength Pareto Evolutionary Algorithm) - (ZITZLER; THIELE, 1999) e NSGA II (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II) - (DEB et al., 2002).

O algoritmo NSGA-II tem sido utilizado em estudos de otimização envolvendo distribuição de campo elétrico, tal como reportado em (LI et al., 2015). Neste estudo,

o NSGA-II é aplicado para minimização do campo elétrico na superfície dos eletrodos internos de isoladores de parede de alta tensão em função de parâmetros dimensionais dos mesmos. Em (DŁUGOSZ; BURCZYŃSKI, 2012), um dos estudos de caso descritos aborda a otimização da estrutura de um micro-atuador eletrotérmico utilizando um algoritmo baseado no NSGA-II. As aplicações bem sucedidas do algoritmo NSGA-II em estudos reportados na literatura associado com o fato do mesmo utilizar simultaneamente os conceitos de dominância e diversidade, o que faz deste algoritmo uma poderosa ferramenta na otimização de problemas multiobjetivo, foram os fatores determinantes para a aplicação do NSGA-II nos modelos apresentados no Capítulo 4. A próxima seção aborda este algoritmo com mais detalhes.

3.4.3 NSGA-II

O algoritmo NSGA-II foi proposto em (DEB et al., 2002), como evolução do NSGA, levando em conta a necessidade de diminuir a complexidade computacional da classificação de dominância e introdução de elitismo. O conceito de elitismo quer dizer que as melhores soluções encontradas, isto é, não dominadas, em cada iteração do algoritmo são preservadas para a próxima iteração. O método de ordenação utilizado no NSGA-II é conhecido como *fast non dominated sorting*. Este método consiste em classificar as soluções de um conjunto de S indivíduos em diversas fronteiras ($N_1, N_2, \dots, N_k$), conforme o grau de dominância de tais soluções. Desta forma, N_1 contém as soluções não dominadas de todo conjunto S . A fronteira N_2 contém as soluções não dominadas de todo conjunto $S - N_1$ e N_3 contém as soluções $S - (N_1 \cup N_2)$, conforme mostrado na Figura 3.5.

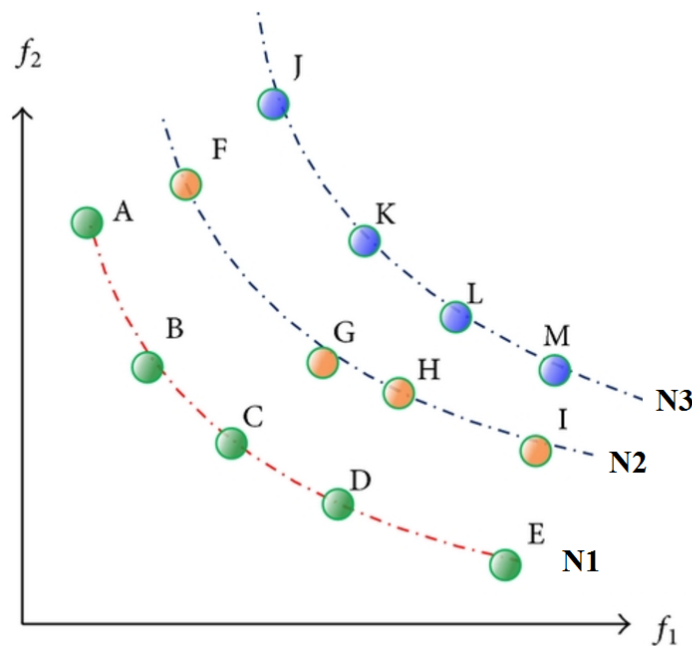


Figura 3.5 – Ordenação por dominância - Adaptado de (WANG; TU; CHEN, 2015)

As soluções que pertencem a uma mesma fronteira, identificadas com o procedimento *fast non dominated sorting*, possuem o mesmo nível de dominância. Para classificá-las, há necessidade de um outro critério, denominado distância de aglomeração (*crowding distance*). O *crowding distance* é uma técnica utilizada para garantir a diversidade dos resultados ao longo da curva de Pareto estimada. O valor do operador, para cada solução da fronteira, consiste no perímetro do cuboide criado a partir dos vértices das soluções vizinhas. Desta forma, os indivíduos são classificados quanto à sua distribuição no conjunto solução, sendo que os indivíduos mais isolados são priorizados.

A seleção multiobjetivo no NSGA-II é realizada por seleção de torneio binário. Nesta seleção, uma solução i é considerada vencedora de um torneio contra uma solução j , se:

- A solução i possui um menor nível de não dominância, ou seja, $rank\ i < rank\ j$;
- Se ambas as soluções possuem o mesmo *rank*, será escolhido aquela solução que possui maior distância da aglomeração.

Quanto ao seu funcionamento, este método é baseado nos conceitos citados anteriormente associados com a teoria tradicional dos algoritmos evolutivos. Primeiramente, é gerada uma população inicial P_0 , a qual é ordenada pelo método *fast non dominated sorting*. Uma outra população Q_i é formada com a aplicação dos operadores genéticos tradicionais, onde i é igual ao número de gerações. Como este é um método elitista, a próxima geração será formada pelos indivíduos mais aptos pertencentes ao conjunto R_i , o qual é formado pela união entre os conjuntos P_i e Q_i . A seleção dos indivíduos mais aptos é realizada por torneio binário. Este processo é repetido até que se atinja o critério de parada. Nas simulações computacionais, o critério de parada utilizado foi o número de gerações. A Figura 3.6 mostra o fluxograma geral do método NSGA-II.

Nas simulações computacionais deste trabalho, um algoritmo NSGA-II extraído de (SESHADRI, 2006) foi utilizado para encontrar as soluções aproximadas para as funções objetivo de inativação microbiana e densidade de energia de um sistema PEF, sendo aplicado nos estudos de caso discutidos no Capítulo 5.

3.5 Considerações Finais

Este capítulo apresentou a base teórica aplicada às simulações computacionais em relação ao planejamento experimental, método dos elementos finitos e algoritmos evolutivos multiobjetivo.

O método dos elementos finitos é aplicado para cálculo da distribuição de campo elétrico no algoritmo implementado em MatLab^{MR}, em simulações para câmaras estáticas, e é utilizado pelo COMSOL^{MR} para solução do problema acoplado de distribuição de

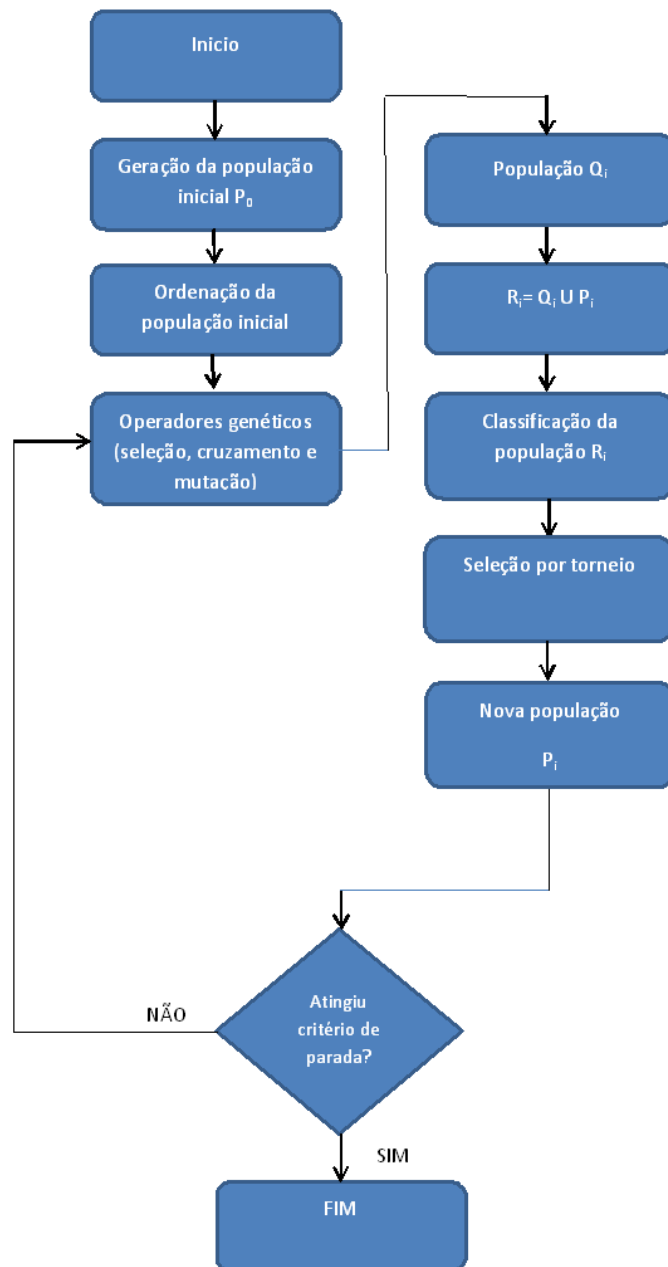


Figura 3.6 – Fluxograma geral do NSGA-II

campo elétrico, temperatura e escoamento do fluido em sistemas dinâmicos. Desta forma, os conceitos e formulações apresentados são a base para entendimento dos cálculos numéricos realizados nos estudos computacionais.

As simulações computacionais do estudo acoplam os resultados da distribuição de campo elétrico com um algoritmo de otimização multiobjetivo. Dentro deste contexto, o algoritmo multiobjetivo NSGA-II é utilizado para obtenção das curvas Pareto estimadas dos dois objetivos em foco, ou seja, a inativação microbiana e a densidade de energia. Este algoritmo é baseado nos procedimentos *fast non dominated sorting* e *crowding distance*, para ordenação e classificação das soluções, conforme abordado neste capítulo.

No próximo capítulo, os modelos computacionais para câmaras estáticas e dinâmicas

serão detalhados.

4 Modelo Computacional

4.1 Introdução

As simulações computacionais aplicadas à tecnologia PEF geram dados espaciais e temporais relevantes em relação à distribuição de campo elétrico, temperatura e dinâmica do fluido, os quais muitas vezes são difíceis de obter experimentalmente. As simulações numéricas são importantes para o projeto de câmaras de tratamento e ajuste das variáveis de processo de um sistema PEF, tais como a magnitude da tensão aplicada e o tempo de tratamento. Neste estudo, o principal objetivo das simulações foi prover soluções ótimas em relação à inativação microbiana e densidade de energia, considerando a importância destes dois parâmetros na eficiência global de um sistema PEF.

Em estudos publicados pelo autor em (ARAÚJO; LOPES; RAMIREZ, 2017), foi utilizado um algoritmo de elementos finitos 3D implementado no MatLab^{MR} para cálculo numérico da distribuição de campo elétrico em câmaras de tratamento estáticas, sem considerar a análise térmica e escoamento do fluido. Nestes estudos, o principal objetivo foi comparar a eficiência de diferentes geometrias de eletrodos e selecionar o arranjo com melhor desempenho para estudos dinâmicos. Para a análise de sistemas dinâmicos envolvendo a distribuição de campo elétrico, temperatura e escoamento do fluido, foi utilizado o pacote comercial multifísico COMSOL^{MR}, considerando sua capacidade computacional para modelar problemas acoplados. O COMSOL^{MR} foi integrado com o software MatLab^{MR}, sendo a interface entre os dois softwares estabelecida por meio do módulo Livelink^{MR}, parte integrante do pacote do COMSOL^{MR}.

Este capítulo apresenta inicialmente o modelo computacional preliminar utilizado para câmaras estáticas. Posteriormente, é abordado com detalhes o modelo elaborado para os estudos com sistemas dinâmicos, no qual é apresentado um fluxograma com a visão geral do modelo e posteriormente uma abordagem mais detalhada de cada etapa, desde a inserção da geometria no COMSOL^{MR} até a formulação matemática do problema multiobjetivo para geração da curva Pareto aproximada pelo algoritmo de otimização.

4.2 Visão Geral do Modelo Computacional para Sistemas Estáticos

A Figura 4.1 mostra o fluxograma computacional aplicado às simulações computacionais com câmaras estáticas. Nestas simulações, foi considerado um líquido genérico de condutividade $0.2S/m$. Inicialmente, os dados geométricos de cada câmara de tratamento são inseridos via arquivo STL (do inglês, *Standard Tessellation Language*) no programa

gerador de malhas NETGEN®, o qual gera a malha de elementos finitos 3D. Os dados geométricos da malha, exportados do gerador de malha, são carregados pelo algoritmo de elementos finitos (Apêndice B) para cálculo da distribuição de campo elétrico, considerando o fenômeno eletrostático, já que o transitório dos pulsos não tem influência significativa no modelo.

A matriz de planejamento experimental para cada geometria de eletrodos é construída a partir das variáveis experimentais e dos respectivos níveis definidos para cada estudo de caso. Foi utilizado planejamento fatorial 3^3 , consistindo de três variáveis e três níveis, englobando parâmetros elétricos e dimensionais. As variáveis elétricas consideradas para o estudo são a magnitude da fonte de alta tensão e o número de pulsos aplicados. O nível máximo da fonte de alta tensão de cada configuração de eletrodos analisada foi especificado de forma a obter um nível de campo elétrico máximo de $50kV/cm$.

Cada combinação da matriz é executada no algoritmo de elementos finitos, o qual retorna com a inativação microbiana média e com a densidade de energia (resultados da etapa de pós processamento). A partir destes resultados, modelos de regressão polinomiais de segunda ordem são obtidos, os quais representam as funções objetivo para o algoritmo de otimização multiobjetivo. Uma análise estatística dos modelos de regressão é feita para avaliação dos efeitos das variáveis experimentais nas variáveis de resposta. O algoritmo de otimização multiobjetivo gera uma fronteira de Pareto estimada contendo as soluções não dominadas para cada configuração de eletrodos ao término do número de gerações previamente definido.

4.2.1 Geometrias e Malhas de Elementos Finitos

O modelo computacional foi aplicado em três arranjos de eletrodos contidos em uma câmara de tratamento com volume de $17.63cm^3$, altura de $3.9cm$ e área da base de $4.52cm^2$. Os eletrodos das câmaras de tratamento foram modelados com condutividade do aço inoxidável de $1.45 \times 10^6 S/m$ a $20^\circ C$ (GIANCOLI, 2005). Este material é usualmente utilizado para construção dos eletrodos para sistemas PEF, devido à alta resistência à corrosão. A Figura 4.2 apresenta as dimensões e condições de contorno aplicadas às câmaras de tratamento estáticas.

A Tabela 4.1 apresenta as características das malhas de elementos finitos obtidas através do gerador de malhas NETGEN® para cada geometria de eletrodos. As malhas foram geradas de forma a manter o número de elementos volumétricos (tetraedros) aproximados para cada configuração de eletrodos, em função da variável dimensional de cada configuração.

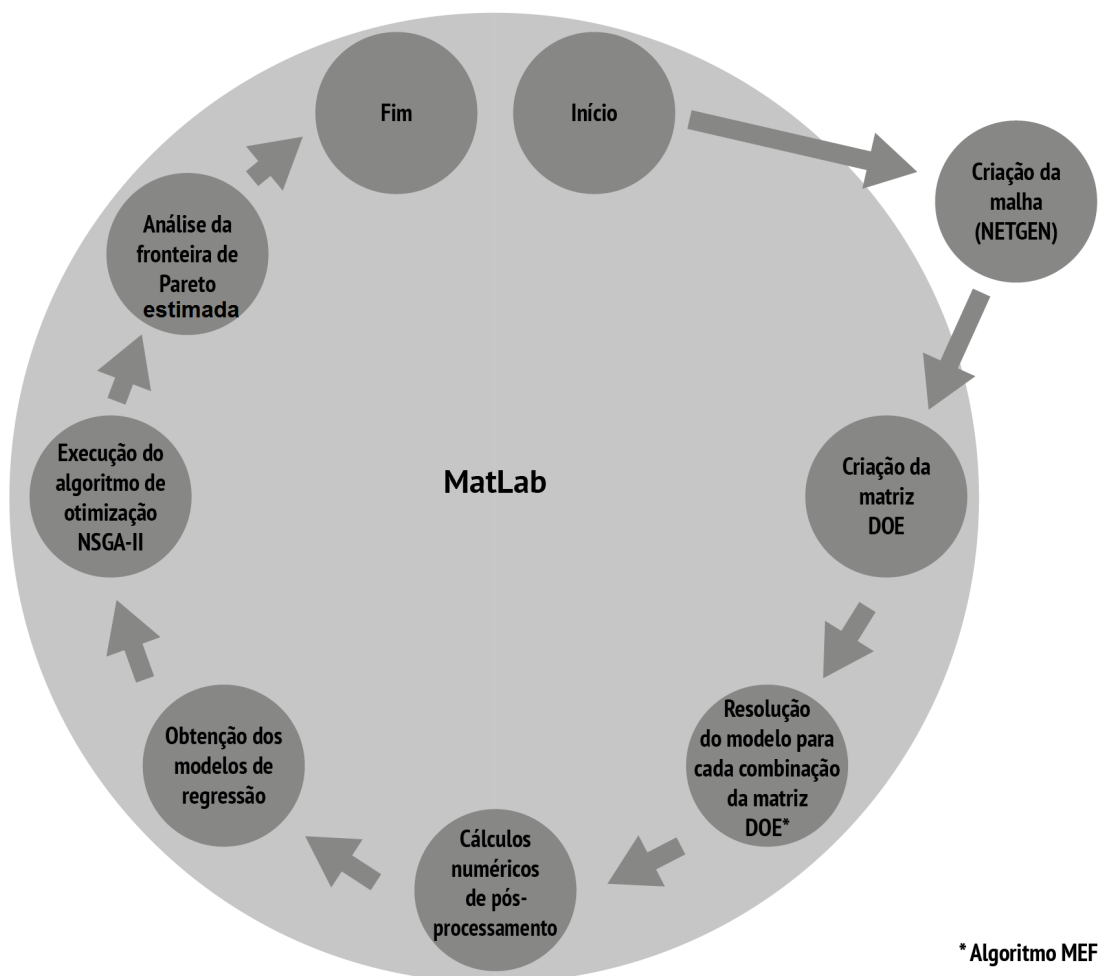


Figura 4.1 – Fluxograma do modelo computacional para sistemas estáticos

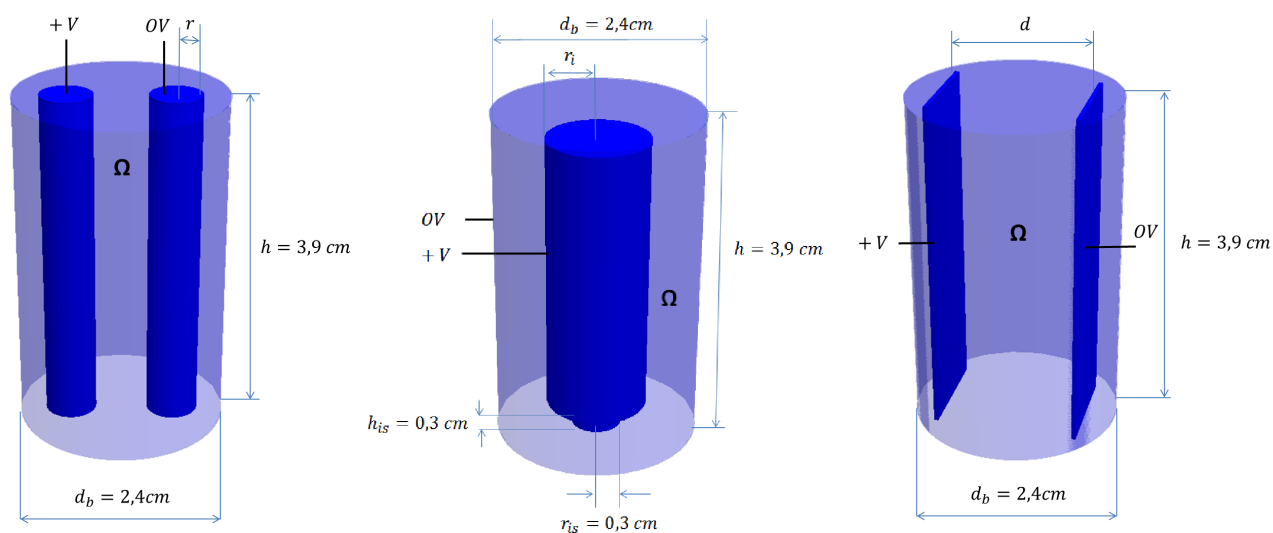


Figura 4.2 – Dimensional e condições de contorno de câmaras de tratamento estáticas

Geometria com Eletrodos Cilíndricos			
Número de Elementos	Raio dos Eletrodos		
	2.2mm	2.6mm	3mm
Elementos Tetraedros	14149	13084	14654
Elementos de Superfície	2880	2528	3750
Nós	2647	2456	2860
Geometria Coaxial			
Número de Elementos	Raio do Eletrodo Interno		
	4mm	6mm	8mm
Elementos Tetraedros	6360	6316	5546
Elementos de Superfície	2278	2420	2214
Nós	1483	1494	1336
Geometria com Eletrodos Planos Paralelos			
Número de Elementos	Gap entre Eletrodos		
	8mm	12mm	16mm
Elementos Tetraedros	6895	6328	6034
Elementos de Superfície	1402	2210	2159
Nós	1330	1344	1297

Tabela 4.1 – Dados geométricos da malha de elementos finitos

4.2.2 Cálculos numéricos pós processamento

4.2.2.1 Campo elétrico

Considerando cada combinação da matriz experimental, em termos de tensão aplicada e variável dimensional de cada arranjo de eletrodos, o campo elétrico em cada elemento da malha foi calculado através do método dos resíduos ponderados no algoritmo de elementos finitos, conforme discutido na Seção 3.3.3. Na etapa de pós processamento, o campo elétrico em cada elemento E_i foi ponderado com o volume de cada tetraedro, de forma a considerar os diferentes volumes dos elementos da malha. O valor médio do campo elétrico ponderado foi calculado através da Equação 4.1, a partir dos valores de E_i ,

$$\overline{E_p} = \frac{\sum_{i=1}^{nel} E_i \cdot v_i}{v_l} \quad (4.1)$$

onde: $\overline{E_p}$ é o módulo do campo elétrico médio ponderado [Vm^{-1}], nel é o número de elementos da malha, E_i é o módulo do campo elétrico em cada elemento da malha [Vm^{-1}], v_i é o volume de cada elemento [m^3] e v_l é o volume do líquido dentro da câmara de tratamento [m^3].

O campo elétrico médio obtido foi utilizado nos cálculos de inativação microbiana e densidade de energia para cada condição da matriz experimental, conforme abordado a seguir.

4.2.2.2 Inativação microbiana

Nas simulações com sistema estático, a inativação microbiana foi calculada a partir da equação geral do modelo de predição de *Hulsheger* (Equação 2.5), em função do campo elétrico, tempo de tratamento e dos parâmetros específicos da bactéria, os quais refletem a resistência do microrganismo ao tratamento. Para a bactéria *E. coli* abordada neste estudo, foram utilizados os parâmetros reportados em (HÜLSHEGER; POTEL; NIEMANN, 1981), conforme segue: campo elétrico crítico $E_c = 4.9kV/cm$, tempo de tratamento crítico $t_c = 12us$ e constante $k_c = 6.3kV/cm$.

4.2.2.3 Densidade de energia

A densidade de energia foi obtida a partir do cálculo do consumo energético por efeito Joule. A energia consumida no líquido em tratamento (u) foi obtida para a malha de elementos finitos através da Equação (4.2), em função do campo elétrico calculado numericamente em cada elemento, do volume de cada tetraedro e do número de pulsos, para uma duração do pulso de 10 us,

$$u = \sum_{i=1}^{nel} \sigma E_i^2 v_i n \Delta t, \quad (4.2)$$

onde: u é a energia total consumida no líquido, nel é o número de elementos da malha, σ é a condutividade do líquido, E_i é o módulo do campo elétrico no elemento i , v_i é o volume do tetraedro i , n é o número de pulsos e Δt a duração do pulso.

De posse do valor do consumo energético u , a densidade de energia foi calculada através da Equação (4.3), sendo a razão entre a energia consumida por efeito Joule e a massa do líquido. A massa do líquido foi obtida considerando a densidade igual à da água a 20 °C ($\rho = 998kg/m^3$),

$$Q_s = \frac{u}{m}, \quad (4.3)$$

onde: Q_s é a densidade de energia [J/kg] e m é a massa do fluido [kg].

Após cálculo da inativação microbiana do microrganismo e da densidade de energia do líquido para todas as condições da matriz experimental, os resultados foram interpolados por regressões polinomiais de segunda ordem para cada configuração de eletrodos, em função das variáveis da matriz experimental, resultando nas funções polinomiais I_r (função inativação microbiana obtida por regressão) e $Q_{s,r}$ função densidade de energia obtida por regressão).

4.2.3 Formulação Matemática para o Problema de Otimização Multiobjetivo

A formulação do problema de otimização multiobjetivo para cada geometria, utilizada para encontrar o conjunto de soluções de inativação microbiana e densidade de energia, foi expressa em termos das equações de regressão I_r e Q_{sr} , representando as duas funções objetivo, e das restrições do problema para cada modelo de câmara de tratamento. A faixa de tensão aplicada V_s e da variável dimensional d para cada geometria de eletrodos foram especificadas de forma que o campo elétrico no líquido não ultrapasse o limite de $50kV/cm$. O limite inferior da tensão aplicada V_i foi especificado como um terço do limite superior. A faixa de tempo de tratamento foi definida entre $50us$ (5 pulsos) e $1050us$ (105 pulsos), de forma a avaliar a eficiência das geometrias em uma faixa larga de tempo de tratamento, já que o limite térmico não foi considerado nestas simulações,

$$\begin{aligned} & \min(I_r, Q_{sr}) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} V_i \leq V \leq V_s \\ 50 \leq t \leq 1050us \\ d_i \leq d \leq d_s \end{cases} \end{aligned} \quad (4.4)$$

No Capítulo 5, os resultados das simulações estáticas para as três geometrias citadas são apresentados e analisados.

4.3 Visão Geral do Modelo Computacional para Sistemas Dinâmicos

O fluxograma do modelo computacional aplicado ao estudo é apresentado na Figura 4.3. Inicialmente, a geometria foi criada no COMSOL^{MR} e todos os parâmetros utilizados para resolver o problema acoplado envolvendo cálculo da distribuição de campo elétrico, temperatura e dinâmica do fluido são inseridos. Um planejamento experimental computacional, consistindo de uma combinação das variáveis tensão aplicada e raio do eletrodo interno da geometria coaxial utilizada, foi utilizado para gerar resultados da intensidade de campo elétrico no líquido em tratamento. A matriz de planejamento experimental foi criada no MatLab^{MR} e executada no COMSOL^{MR}, utilizando a interface Livelink^{MR}.

A distribuição de campo elétrico foi obtida através do COMSOL^{MR}, o qual calcula numericamente o campo elétrico através as equações governantes apresentadas na Seção 3.3.2 e condições de contorno do problema eletrostático para a geometria analisada. Os valores de campo elétrico médio dentro do líquido obtidos na etapa de pós-processamento

no MatLab^{MR} foram ajustados com uso de regressão não linear, de forma a obter uma expressão de cálculo de campo elétrico médio no líquido em função das variáveis em estudo. Desta forma, ao invés de ajustar por regressão não linear os dados de inativação microbiana e densidade de energia, tal como realizado nos estudos com câmaras estáticas reportados em (ARAÚJO; LOPES; RAMIREZ, 2017), resultando em duas equações quadráticas com vários termos, foi possível reduzir o ajuste para uma equação com um único coeficiente, conforme será abordado na Seção 4.3.3.1.

A expressão de campo elétrico obtida foi incorporada às funções objetivo de inativação microbiana e densidade de energia. Nas simulações dinâmicas, foi utilizado o modelo de predição de *Weibull* para cálculo numérico da inativação microbiana, considerando sua capacidade de explicar, com maior exatidão, as inativações microbianas de maior amplitude em relação ao modelo de predição de *Hulsheger* (PEÑA; ELEZ-MARTÍNEZ; MARTÍN-BELLOSO, 2011).

Um algoritmo de otimização multiobjetivo NSGA-II, extraído de (SESHADRI, 2006), foi utilizado para gerar a fronteira de Pareto estimada contendo as soluções não dominadas ao término do número de gerações previamente definido. Este modelo computacional foi utilizado para os estudos de caso envolvendo a comparação entre diferentes tipos de líquidos, diferentes microrganismos, sistemas multi-estágios e modelos de predição de inativação microbiana.

4.3.1 Modelagem no COMSOL^{MR} Multiphysics

O COMSOL Multiphysics^{MR} é bastante utilizado nas áreas da Física e Engenharia, principalmente para resolução de problemas acoplados ou "multifísicos", utilizando o método dos Elementos Finitos. Neste estudo, três módulos do COMSOL^{MR} foram acoplados para modelagem do sistema: *AC/DC* para eletrostática, *Heat transfer* para transferência de calor e *Laminar Flow* para fluidodinâmica (escoamento laminar). As etapas de pré-processamento são discutidas a seguir.

4.3.1.1 Geometria e Malha de Elementos Finitos

Nas simulações numéricas deste trabalho, foi utilizada uma geometria de eletrodos coaxial. Em estudos prévios com câmaras de tratamento estáticas reportados em (ARAÚJO; LOPES; RAMIREZ, 2017), no qual foram comparadas curvas Pareto estimadas para diferentes geometrias de eletrodos, a geometria coaxial apresentou melhores resultados em termos de inativação microbiana e densidade de energia em relação às geometrias de eletrodos plano paralelos e com arranjo de eletrodos cilíndricos tipo *needle*. Desta forma, nestes estudos optou-se pela câmara de tratamentos coaxial, com a incorporação de isoladores e anéis de equalização visando a redução da magnitude do campo elétrico em regiões com risco de disrupções no líquido em tratamento.

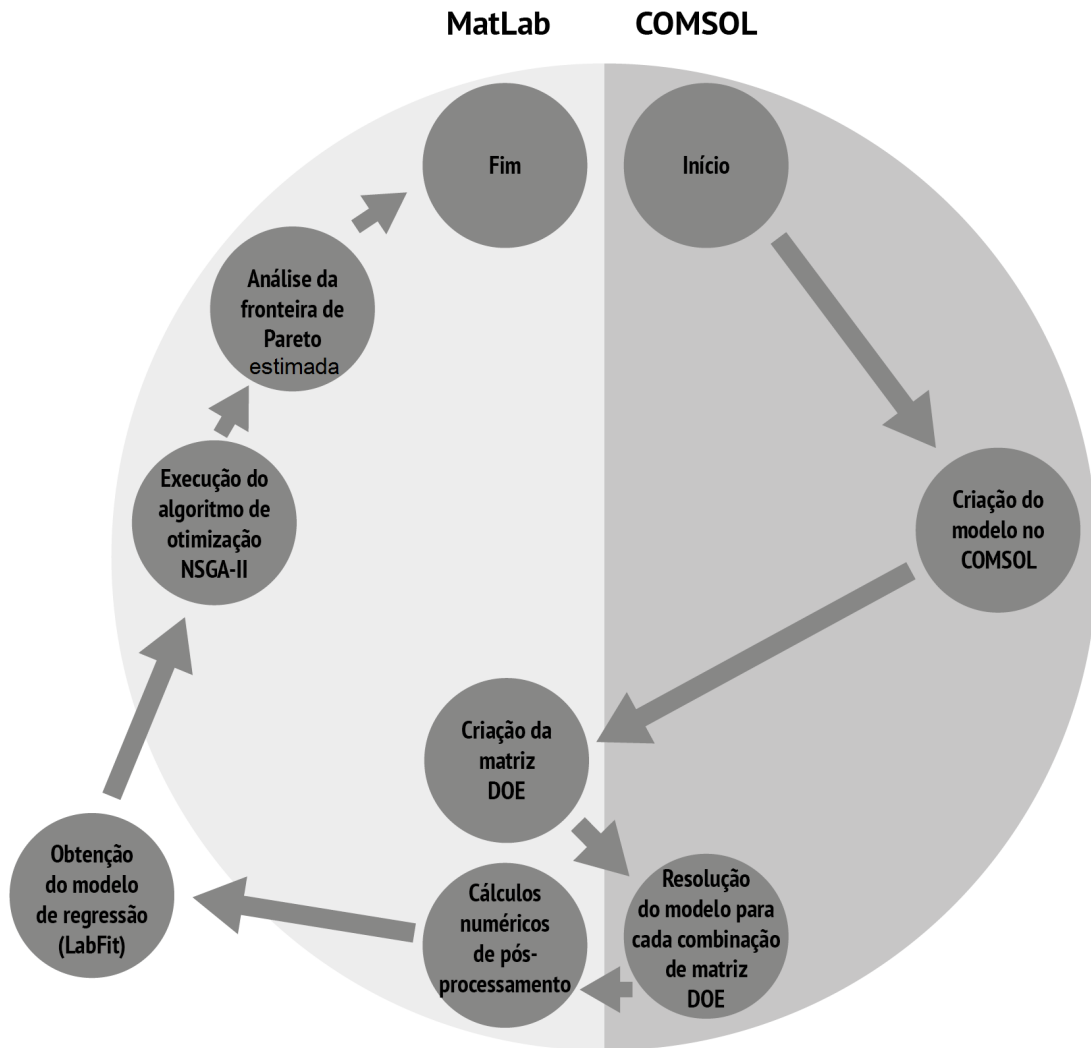


Figura 4.3 – Fluxograma do modelo computacional para sistema dinâmico

A Figura 4.4 mostra as dimensões da câmara de eletrodos coaxial em um corte transversal. A câmara possui um volume efetivo de líquido entre 24 e 29ml, dependendo do valor do raio do eletrodo interno utilizado, o qual é considerado uma variável dimensional para o problema, com valores entre 0.5 e 1.0cm,

A aproximação da solução gerada pelo COMSOL^{MR} pelo método dos elementos finitos em relação à solução exata depende do refinamento da malha utilizada. A discretização da malha minimiza o erro entre as soluções do COMSOL^{MR} e a solução exata, considerando que mais pontos do domínio são utilizados pelo *solver* do software para o cálculo numérico. Por outro lado, o refinamento da malha eleva o uso de memória e esforço computacional durante as simulações. O COMSOL^{MR} possibilita configurar 9 tamanhos diferentes dos elementos da malha, sendo que o formato da geometria padrão é o tetraédrico. A Figura 4.5 mostra a malha de elementos finitos 3D gerada pelo COMSOL^{MR} para a geometria coaxial utilizada nos estudos para o tamanho de malha 1 (menor refinamento) e tamanho de malha 5 (configuração *default*).

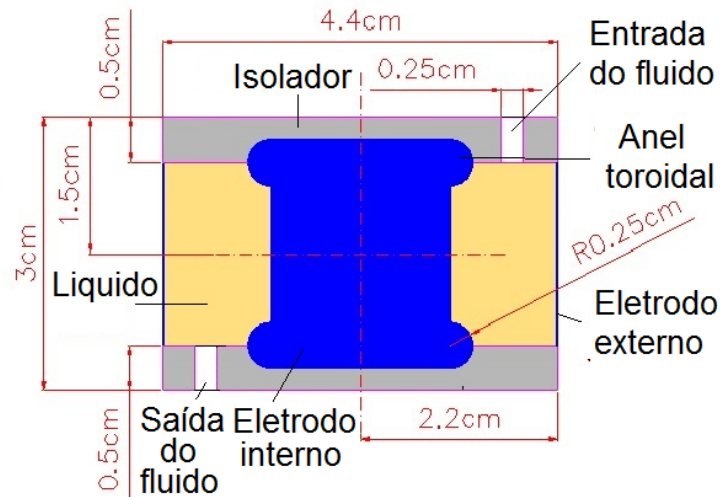


Figura 4.4 – Seção transversal da câmara de tratamento com arranjo de eletrodos coaxial

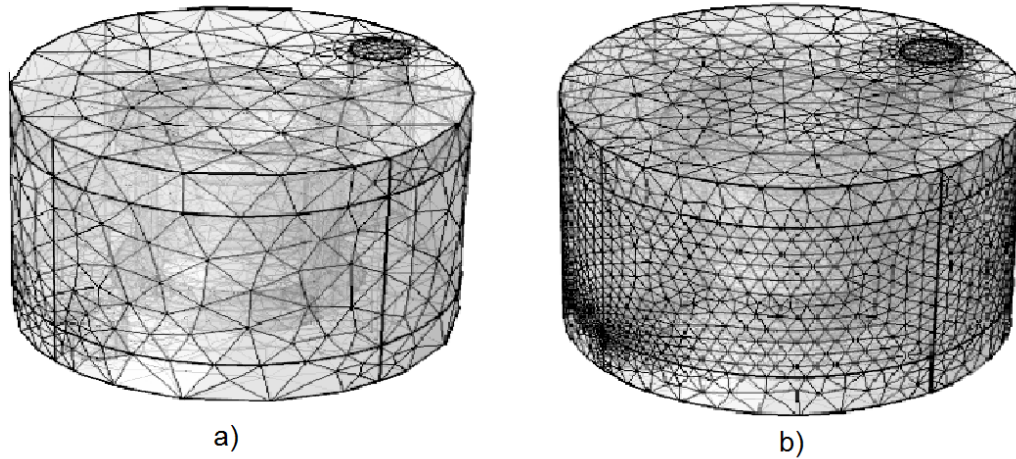


Figura 4.5 – Malha de Elementos Finitos 3D gerada pelo COMSOL^{MR} para a geometria coaxial: a) Malha 1 (menor refinamento) b) Malha 5 (configuração *default*)

Para definição do grau de refinamento da malha, ponderando a exatidão dos resultados com o esforço computacional, foram realizadas simulações com os diferentes tamanhos de malha, aplicando pulso de alta tensão de 24kV com duração de 10 μ s na geometria coaxial, considerando um raio interno de 1cm. As simulações foram executadas em um servidor Dell Precision T3500 com a seguinte configuração: 24GB de memória, 2.8Ghz e HD de 500GB, sendo realizadas no COMSOL^{MR} utilizando a interface Livelink^{MR} para efetuar a parametrização via MatLab^{MR}. Nestas simulações, foram avaliados os resultados de campo elétrico médio ponderado (E_p), temperatura média ponderada (T_p) no líquido e velocidade média do líquido na região de tratamento (v_m). Conforme dados apresentados, há uma boa convergência dos valores de campo elétrico e temperatura a partir da malha 1 do COMSOL^{MR} (menor refinamento) e dos dados de velocidade média a partir da malha 3.

Malha	$E_p(kV/cm)$	$T_p(^{\circ}C)$	$v_m(m/s)$
1	20.30	21.05	0.097
2	20.29	21.03	0.101
3	20.27	21.03	0.117
4	20.26	21.02	0.118
5	20.26	21.02	0.118
6	20.25	21.02	0.119
7	20.25	21.02	0.119
8	20.25	21.01	0.119
9	20.25	21.01	0.119

Tabela 4.2 – Dados utilizados para definição do tipo de malha

A Figura 4.6 apresenta o tempo de simulação em função do $\log_{10}$ do número de elementos (ne) para cada tipo de malha (1 a 9). O tempo de simulação obtido para o pulso aplicado foi projetado para 30 pulsos (número máximo de pulsos aplicado nas simulações), de forma a estimar o tempo de simulação total. Observa-se que o tempo total de simulação aumenta de forma mais significativa a partir da malha tipo 4. A malha 3 foi selecionada para as simulações numéricas, considerando a convergência dos valores de velocidade média e o tempo de simulação de aproximadamente 1.8 horas para esta malha, aceitável para os estudos computacionais. A malha 3 possui um total de aproximadamente 3500 elementos tetraédricos.

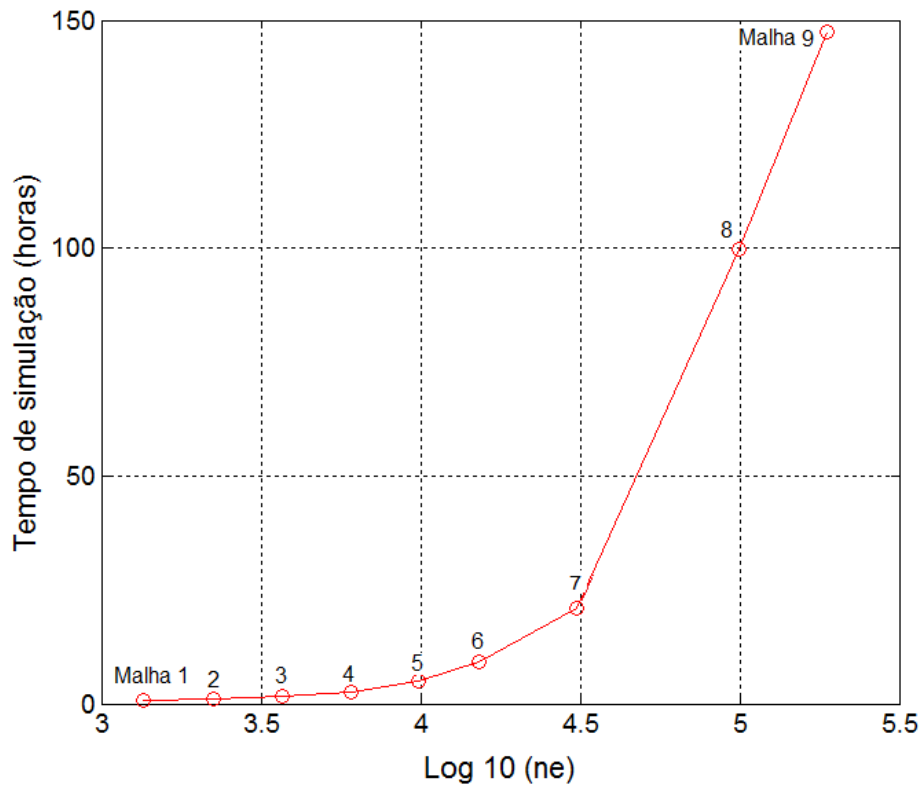


Figura 4.6 – Tempo de simulação em função do número de elementos da malha (1 a 9)

4.3.1.2 Propriedades dos Materiais

Após inserção da geometria e parametrização da malha de elementos finitos, as propriedades dos materiais foram configuradas. Os eletrodos e anéis de equalização foram modelados com aço inoxidável, considerando as boas características deste material em relação à resistência à corrosão. Os isoladores (inferior e superior) foram modelados com PTFE (teflon^{MR}). As propriedades dos materiais utilizados nos eletrodos e isoladores foram obtidas da base de dados do COMSOL^{MR}, conforme mostrado na Tabela 4.3.

Aço inoxidável (eletrodos)		
Propriedade	Unidade	Valor
Condutividade térmica (k)	W/mK	44.5
Capacidade térmica (C_p)	J/kgK	475
Densidade (ρ)	kg/m^3	7850
Teflon (isoladores)		
Propriedade	Unidade	Valor
Condutividade térmica (k)	W/mK	0.24
Capacidade térmica (C_p)	J/kgK	2200
Densidade (ρ)	kg/m^3	1050

Tabela 4.3 – Propriedades físicas dos materiais utilizados nos eletrodos e isoladores

Nos estudos de caso apresentados no capítulo 5, foram utilizados diferentes tipos de sucos (uva e laranja) para avaliação da eficiência do sistema. As propriedades físico-químicas dos sucos variam em função da temperatura do líquido. O calor específico, condutividade térmica e densidade variam também em função do valor de matéria seca do mesmo (X), ou seja, da quantidade que resta da massa do material após extrair toda a parte líquida. A viscosidade do líquido varia em função do grau Brix do mesmo (B_x), o qual representa a quantidade de sacarose diluída em 100g da solução. As expressões das propriedades dos sucos foram extraídas de estudos da literatura, conforme apresentado na Tabela 4.4.

4.3.1.3 Forma de Onda do Pulso Aplicado

A forma de onda do pulso retangular aplicado aos eletrodos da câmara de tratamento para uma tensão de 24kV é apresentada na Figura 4.7. A largura do pulso foi configurada para 10 μs , a qual representa um valor típico para a aplicação utilizando pulsos retangulares (LOEFFLER, 2006). O pulso foi configurado no COMSOL^{MR} com tempos de subida e descida de 2 μs de forma a evitar erros de singularidade durante o processamento, além de aproximar das especificações reais de fontes de alta tensão para este tipo de aplicação. De acordo com (LOEFFLER, 2006), os valores de dv/dt na subida e/ou descida do pulso não têm influência significativa na eficiência do tratamento, desde que sejam essencialmente menores do que a largura do pulso.

Para avaliar a influência do transitório do pulso de tensão no modelo, a densidade de corrente (J) foi analisada durante o tempo de subida do pulso de tensão. A Figura

Suco de uva		
Propriedade	Unidade	Equação
Cond. térmica (k)	W/mK	$[0.565 + 1.8x10^{-3}(T - 273) - 6x10^{-6}(T - 273)^2](1 - 5.4x10^{-2}X)^{(a)}$
Capac. térmica (C_p)	J/kgK	$1386 + 21.6(100 - X) + 2T^{(b)}$
Densidade (ρ)	kg/m^3	$1768 - 7(100 - X) - 0.928(T - 273) + 0.006(100 - X)(T - 273)^{(c)}$
Viscosidade (μ)	$mPa.s$	$e^{-4.7989+4.63824x10^5T^{-2}+1.98x10^{-4}B_x^2\ln B_x}^{(b)}$
Cond. elétrica (σ)	S/m	$0.0015(T - 273) + 0.0481^{(d)}$
Suco de laranja		
Propriedade	Unidade	Equação
Cond. térmica (k)	W/mK	$0.079 + 0.523(100 - X) + 5.8x10^{-5}(T - 273)^{(e)}$
Capac. térmica (C_p)	J/kgK	$1424 + 26.7(100 - X) + 2.45(T - 273)^{(e)}$
Densidade (ρ)	kg/m^3	$1428.5 - 4.549(100 - X) - 0.231(T - 273)^{(e)}$
Viscosidade (μ)	$mPa.s$	$1.03x10^{-4}(-4x10^{-5}B_x^2 + 8x10^{-5}B_x + 1.02)^{-19.9}e^{3.065x10^3T^{-1}}^{(e)}$
Cond. elétrica (σ)	S/m	$0.0087(T - 273) + 0.165^{(f)}$

^(a) Extraído de (SIMION et al., 2009)

^(b) Extraído de (SIMION et al., 2009)

^(c) Extraído de (SIMION et al., 2011)

^(d) Extraído de (ZHANG, 2007)

^(e) Extraído de (TELIS-ROMERO et al., 1998)

^(f) Extraído de (IBARZ; GONZALEZ; ESPLUGAS, 1994)

Tabela 4.4 – Expressões das propriedades físico-químicas dos sucos de uva e laranja

4.9 mostra a densidade de corrente para dois casos: circuito puramente resistivo (R) e circuito resistivo/capacitivo (RC), considerando uma permissividade relativa do suco de uva de 80 (ZHU; GUO; WU, 2012), sendo que alterações da mesma em função da temperatura e frequência não alteram significativamente o valor da densidade de corrente. Conforme mostrado, a forma de onda da densidade de corrente não é significativamente afetada pelo capacitor, o que significa que o modelo é predominantemente resistivo para as características do pulso considerado. Com relação à distribuição do campo elétrico, como a tensão é diretamente aplicada aos eletrodos no arranjo coaxial, sem a impedância do gerador de tensão, e considerando uma distribuição uniforme da resistência e capacitância dentro do fluido, a distribuição do campo elétrico dentro do líquido não é afetada pela capacitância.

Com relação à frequência dos pulsos, a mesma foi calculada em função do tempo de escoamento do fluido dentro da câmara de tratamento, conforme será apresentado na Seção 4.3.3.3, considerando que o tempo de escoamento deve estar sincronizado com a frequência dos pulsos para que uma dada porção do fluido receba todos os pulsos parametrizados da fonte de alta tensão durante o tempo de escoamento do mesmo dentro da câmara de tratamento.

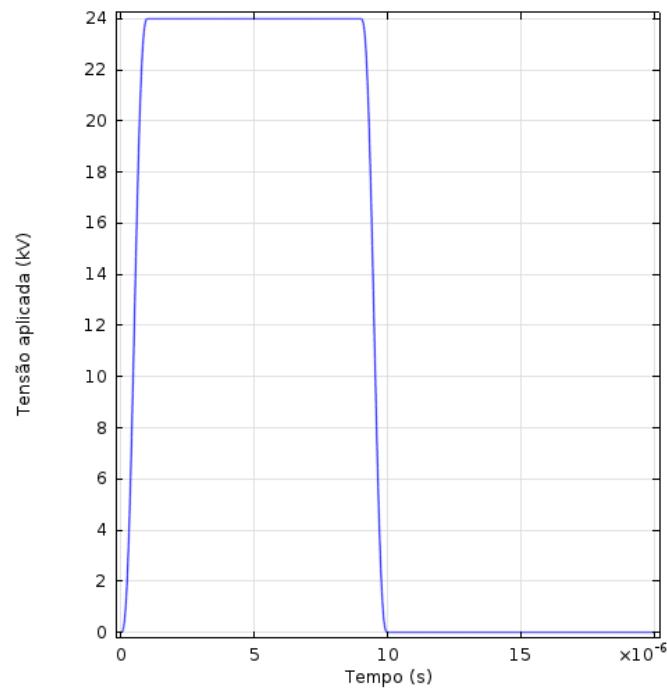


Figura 4.7 – Pulso de tensão aplicado nos eletrodos

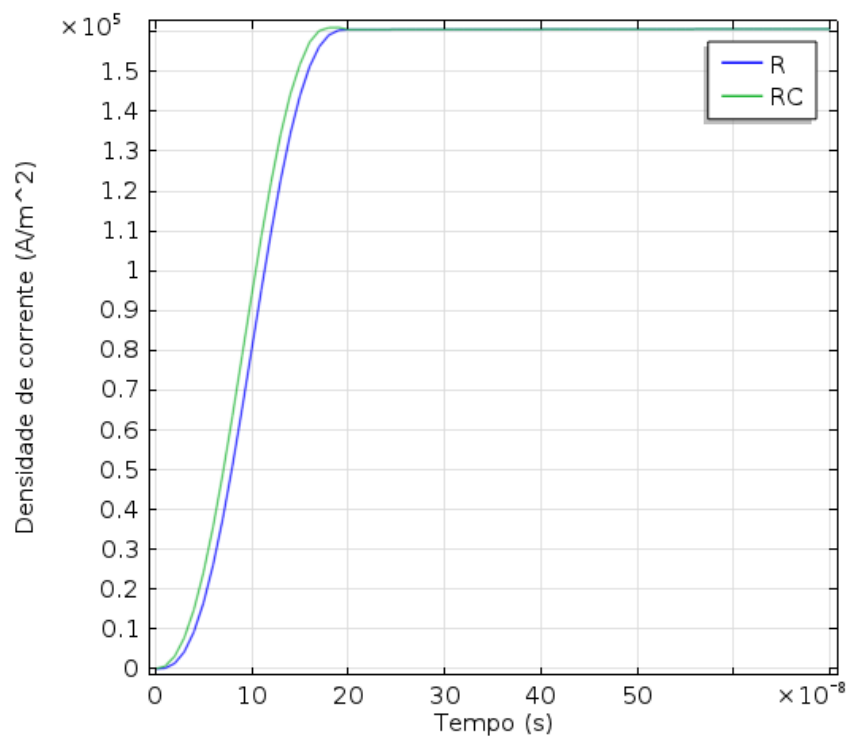


Figura 4.8 – Densidade de corrente para fluido modelado por R e por RC

4.3.1.4 Modelagem eletrostática

Considerando que o transitório do pulso não tem influência significativa no modelo, a modelagem eletrostática foi utilizada para o estudo. A modelagem eletrostática foi realizada através do módulo AC/DC do COMSOL^{MR}, o qual é indicado para aplicações

em simulações envolvendo problemas eletromagnéticos de baixa frequência. As equações de cálculo numérico de campo elétrico utilizadas pelo módulo são apresentadas a seguir.

A Equação para cálculo de potencial elétrico é baseada no princípio de conservação da carga,

$$\nabla \cdot (\sigma(T) \nabla V) = 0 \quad (4.5)$$

onde $\sigma(T)$ é a condutividade elétrica dependente da temperatura [Sm^{-1}] e V o potencial elétrico [V].

Assumindo que o campo elétrico pulsante não induz um campo magnético variante no tempo, a relação entre campo elétrico e potencial elétrico é descrita por:

$$\mathbf{E} = -\nabla V, \quad (4.6)$$

onde $\mathbf{E}$ é o campo elétrico [Vm^{-1}] e V o potencial elétrico [V].

As condições de contorno para o modelo da câmara de tratamento foram estabelecidas de acordo com os potenciais aplicados nos eletrodos, ou seja, potencial zero para o eletrodo externo e o potencial do pulso aplicado para o eletrodo interno, conforme mostrado na Figura 4.9.

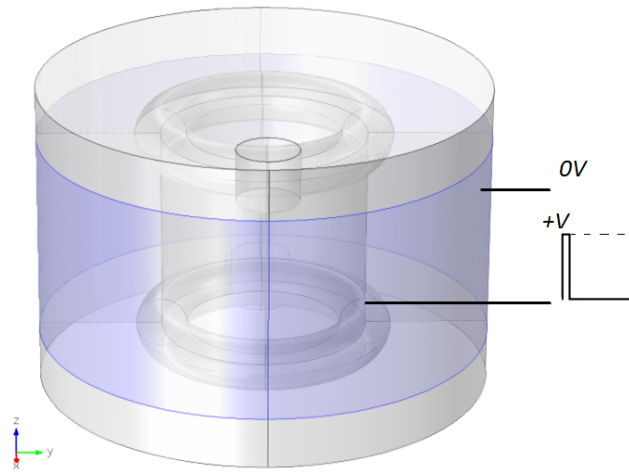


Figura 4.9 – Condições de contorno de potenciais elétricos para a geometria coaxial

A faixa de campo máximo para tratamento de líquidos utilizando a tecnologia PEF é de 10 a 80kV/cm (MIKŠ-KRAJNÍK et al., 2015). Neste estudo, foi adotado valor de campo elétrico máximo de 50kV/cm, de forma a evitar disrupções no líquido em tratamento.

4.3.1.5 Modelagem térmica

Para a modelagem térmica da câmara de tratamento, foi utilizado o módulo *Heat Transfer* do COMSOL^{MR}. Para um meio condutivo, este módulo utiliza a Equação 4.7 de transferência de calor para cálculo da temperatura, considerando acoplamento com a distribuição de campo elétrico e velocidade do fluido,

$$\rho C_p(T) \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) + \nabla[-k \cdot \nabla T] = Q \quad (4.7)$$

onde ρ representa a densidade do líquido [kgm^{-3}], $C_p(T)$ é a capacidade térmica [$m^2s^{-2}K^{-1}$], T é a temperatura [K], k é a condutividade térmica [$Wm^{-1}K^{-1}$] e $\mathbf{v}$ é a velocidade do fluido [m/s].

A fonte de calor Q é proveniente da dissipação de energia por efeito Joule no líquido, sendo expressa por:

$$Q = \sigma(T) |\mathbf{E}|^2, \quad (4.8)$$

onde $\sigma(T)$ é a condutividade elétrica dependente da temperatura do meio [Sm^{-1}] e $|\mathbf{E}|$ é a intensidade do campo elétrico [Vm^{-1}].

Na superfície de entrada do fluido na câmara de tratamento, foi aplicada a condição de contorno térmica de temperatura de entrada do líquido T_{in} . As superfícies externas dos isoladores da câmara de tratamento foram parametrizadas como isolantes térmicos e a superfície do eletrodo externo como condutor de calor, aplicando as condições de contorno de transferência de calor de acordo com a Equação (4.9),

$$\mathbf{n} \cdot (-k \nabla T) = h \cdot (T_{ext} - T) \quad (4.9)$$

onde $\mathbf{n}$ representa o vetor de direção normal, T_{ext} é a temperatura ambiente [K] e h é o coeficiente de transferência de calor [$Wm^{-2}K^{-1}$].

O coeficiente de transferência de calor h foi calculado com base na equação de *Nusselt* (BEJAN; KRAUS, 2003) aplicada para a convecção de ar livre em cilindros verticais. Para a câmara de tratamento utilizada no estudo, L representa a dimensão vertical do eletrodo externo. O modelo de predição de *Squire-Eckert* (BEJAN; KRAUS, 2003) foi utilizado para o cálculo do número médio de Nusselt (Nu). As propriedades do ar para aplicação da equação de *Nusselt* foram avaliadas a partir da temperatura média da superfície do eletrodo externo e da temperatura ambiente considerada no estudo ($T_{ext} = 20^\circ C$),

$$h = \frac{Nu k_{ar}}{L} \quad (4.10)$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor [$Wm^{-2}K^{-1}$], N_u é o número de *Nusselt*, k_{ar} é a condutividade térmica do ar [$Wm^{-1}K^{-1}$] e L é a dimensão vertical do eletrodo externo[m].

O valor calculado do coeficiente h foi de $3,35Wm^{-2}K^{-1}$. Considerou-se o valor médio entre os coeficientes calculados para as condições de temperatura máxima e mínima na superfície do eletrodo externo. Para a condição de temperatura máxima da superfície do eletrodo externo ($35.4^{\circ}C$), o coeficiente h obtido foi de $6,6Wm^{-2}K^{-1}$. Para a condição de menor temperatura no eletrodo externo ($20.6^{\circ}C$), o coeficiente calculado h foi $0.1Wm^{-2}K^{-1}$. Neste estudo, o impacto de h no aumento da temperatura não foi significativo. Por exemplo, na condição de máxima temperatura no líquido, variando o coeficiente h entre os valores de mínimo a máximo calculados ($0,1$ a $6,6Wm^{-2}K^{-1}$), a temperatura no líquido variou apenas $5 \times 10^{-4}^{\circ}C$. As condições de contorno térmicas e a transferência de calor da superfície do eletrodo externo para o ambiente são mostradas na Figura 4.10.

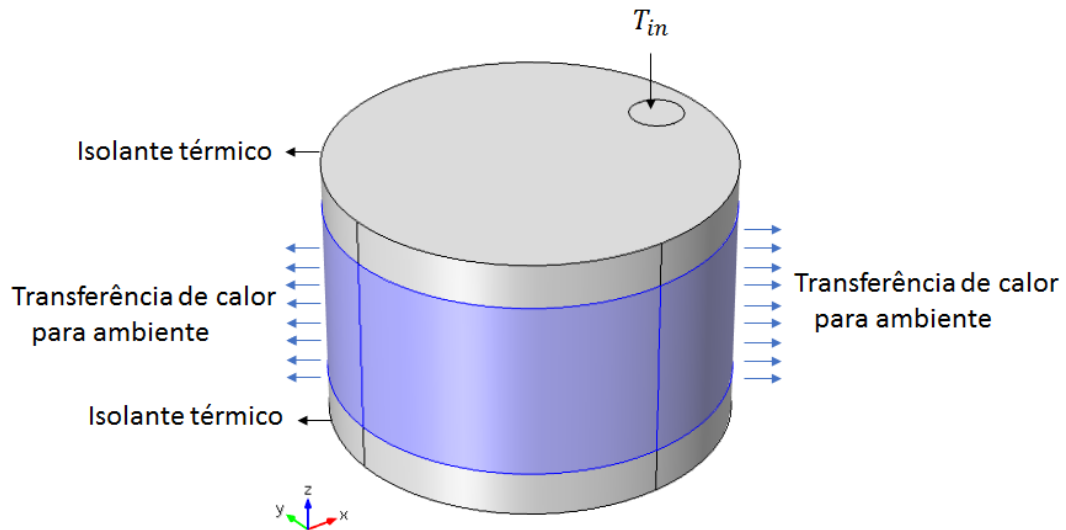


Figura 4.10 – Condições de contorno para modelo térmico e transferência de calor do eletrodo externo para ambiente

4.3.1.6 Modelagem da dinâmica do fluido

No estudo computacional da dinâmica de fluidos realizado através do módulo *Laminar flow*, a solução para cálculo numérico dos campos de pressão e velocidade é baseada nas equações diferenciais de conservação da massa (equação de continuidade) e na de conservação do momento linear, também conhecida como equação de *Navier-Stokes*. A equação de continuidade para um fluido compressível (densidade não constante) pode ser expressa pela Equação 4.11 (BATCHELOR, 2000), na qual a derivada temporal da densidade $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ representa o acúmulo ou perda de massa no sistema, enquanto o termo

$\nabla \cdot (\rho \mathbf{v})$ representa a diferença entre as vazões inicial e final,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (4.11)$$

onde ρ é a densidade do fluido [kgm^{-3}] e $\mathbf{v}$ representa a velocidade de escoamento [ms^{-1}].

A conservação do momento linear é expressa através da Equação (4.12) (BATCHELOR, 2000). O primeiro termo é a variação da quantidade de movimento. O segundo termo está relacionado com a convecção durante o movimento do fluido devido à diferença de condições do meio líquido, por exemplo, entre densidades no meio. O terceiro e quarto termos são referentes às forças de superfície que atuam em um volume de controle infinitesimal, sendo dividida em uma resultante do campo de pressões e outra devido à deformações geradas pelo campo de velocidades. Finalmente, o quinto termo representa as forças externas aplicadas ao fluido,

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{f} \quad (4.12)$$

onde ρ representa a densidade do líquido [kgm^{-3}], $\mathbf{v}$ é a velocidade [ms^{-1}], P é a pressão [Pa] e μ é a viscosidade do fluido [$Pa \cdot s$].

As equações 4.11 e 4.12 são resolvidas para um conjunto particular de condições de contorno (velocidade e pressão) aplicadas ao problema. A Figura 4.11 apresenta as condições de contorno utilizadas para a fluidodinâmica. No COMSOL^{MR}, é necessário informar uma velocidade de entrada na superfície de entrada do líquido na câmara de tratamento v_{in} e a pressão na superfície de saída do líquido, a qual é a pressão ambiente de $1atm$. Desta forma, o fluido entra na câmara com velocidade definida, escoar pela região de tratamento e sai com a pressão definida pela condição de contorno.

O número de *Reynolds* define o tipo de escoamento, conforme segue: $Re < 2000$ (escoamento laminar), $2000 < Re < 2300$ (indeterminado) e $Re > 2300$ (escoamento turbulento) (BATCHELOR, 2000). Diante do propósito dos estudos de fluidodinâmica em determinar o tempo de trânsito do líquido dentro da câmara a partir da velocidade média do fluido de forma a sincronizar com a frequência da fonte de alta tensão, sem impacto significativo do escoamento do fluido na temperatura do líquido, foi definido o tipo de escoamento laminar, considerando que as variações temporais de natureza aleatória na trajetória do fluido e flutuações irregulares de velocidade e pressão no escoamento de um fluido turbulento dificultam a modelagem e uma boa exatidão no cálculo da velocidade do fluido. Neste ponto, é importante destacar a diferença entre o tempo de trânsito do líquido dentro da câmara t_t , o qual é o tempo de exposição do líquido ao tratamento, e o tempo de tratamento t , o qual é o produto entre número de pulsos aplicados e a duração do pulso.

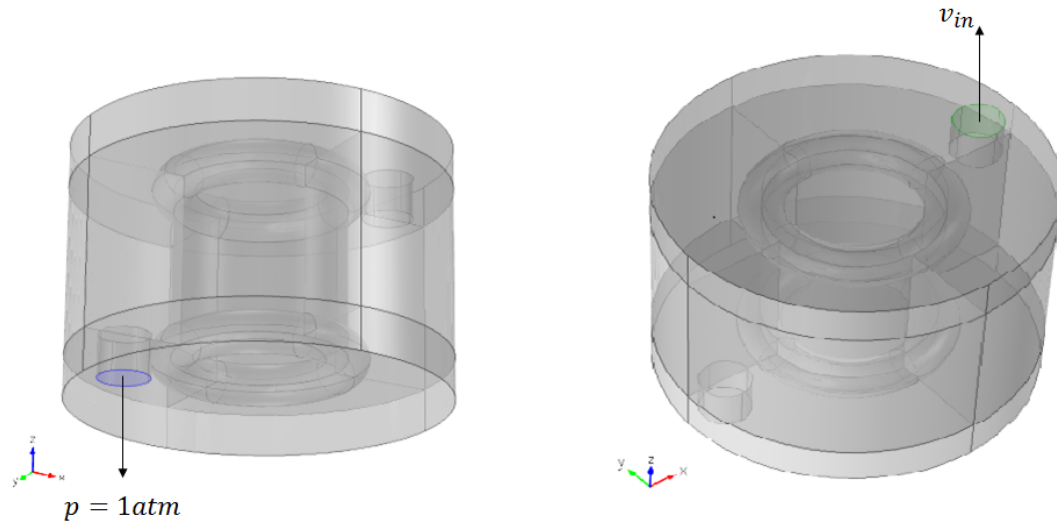


Figura 4.11 – Condições de contorno para dinâmica de escoamento do fluido

O número de *Reynolds* é calculado em função da velocidade do escoamento, diâmetro hidráulico e parâmetros do fluido (densidade e viscosidade dinâmica) (BACHELOR, 2000),

$$Re = \frac{\rho v D_H}{\mu} \quad (4.13)$$

onde Re é o número de *Reynolds* (adimensional), ρ é a densidade [$kg.m^{-3}$], v é a velocidade [m/s], D_H o diâmetro hidráulico [m] e μ a viscosidade dinâmica do líquido [$Pa.s$].

4.3.2 Processamento

Após a finalização da etapa de pré-processamento, as simulações foram realizadas a partir de uma matriz de planejamento experimental computacional. A matriz DOE foi criada com as variáveis relacionadas com a distribuição de campo elétrico (tensão aplicada (V) e raio do eletrodo interno da geometria coaxial (r_i)) com seus respectivos níveis, consistindo de um planejamento fatorial 2^5 (duas variáveis com cinco níveis para cada uma), totalizando 32 combinações de teste. O limite inferior é identificado como --, intermediário como 0 e superior como ++. Os limites superiores de (V) e (r_i) foram especificados de forma a limitar o campo elétrico no líquido em $50kV/cm$ para evitar disrupções no líquido em tratamento. O limite inferior da tensão aplicada foi especificado como dois terços do limite superior. A Tabela 4.5 mostra as variáveis e níveis utilizados na matriz DOE.

Para cada combinação de variáveis, o COMSOL^{MR}, via interface, retorna para o MatLab^{MR} os vetores de resultados de campo elétrico e temperatura dos elementos

Fator	Unidade	Nível				
		- -	-	0	+	+ +
Tensão aplicada (V)	kV	16	18	20	22	24
Raio do eletrodo interno (r_i)	cm	0.5	0.625	0.75	0.875	1.0

Tabela 4.5 – Fatores e respectivos níveis do planejamento experimental computacional

da malha. De posse destes resultados, são realizados os cálculos de pós-processamento discutidos na próxima seção.

4.3.3 Cálculos numéricos pós processamento

4.3.3.1 Campo elétrico

O campo elétrico médio dentro da câmara de tratamento foi calculado conforme a Equação (4.14). Nesta equação, o campo elétrico em cada elemento da malha é ponderado pelo volume do elemento, de forma a obter resultados numéricos mais precisos,

$$\overline{E_p} = \frac{\sum_{i=1}^{nel} E_i \cdot v_i}{v_l} \quad (4.14)$$

onde $\overline{E_p}$ é o campo médio ponderado [Vm^{-1}], nel é o número de elementos da malha, E_i é o campo elétrico em cada elemento da malha [Vm^{-1}], v_i é o volume de cada elemento [m^3] e v_l é o volume do líquido dentro da câmara de tratamento [m^3].

A uniformidade do campo elétrico dentro da câmara de tratamento é mensurada a partir do cálculo do desvio padrão do campo elétrico conforme Equação (4.15). A diferença entre o campo elétrico em cada elemento E_i é ponderado em função do volume de cada tetraedro, de forma a considerar os diferentes volumes dos elementos da malha,

$$\sigma_E = \sqrt{\frac{1}{v_l} \sum_{i=1}^{nel} (E_i - \overline{E_p})^2 v_i} \quad (4.15)$$

onde σ_E é o desvio padrão do campo elétrico; nel é o número de elementos da malha, E_i é módulo do campo elétrico em cada elemento i [Vm^{-1}], $\overline{E_p}$ é a média ponderada dos valores de campo elétrico pelos volumes dos elementos, v_i é o volume de cada elemento i [m^3] e v_l é o volume de líquido [m^3].

Para fins de comparação das uniformidades de campo elétrico para diferentes dimensões da câmara e tensão aplicada nos eletrodos, foi utilizado o coeficiente de variação CV , expresso pela relação entre o desvio padrão σ_E e a média ponderada $\overline{E_p}$, conforme

Equação (4.16):

$$CV = \frac{\sigma_E}{E_p}, \quad (4.16)$$

Os valores de campo elétrico obtidos através da Equação (4.14) foram ajustados por regressão não linear de forma a obter a equação de campo elétrico médio em função das variáveis do problema (tensão aplicada e raio do eletrodo interno). Este ajuste, realizado através do software Labfit^{MR}, foi baseado na equação clássica do módulo do campo elétrico para a geometria coaxial para um dado raio r referente ao ponto no qual o campo elétrico está sendo calculado. A expressão resultante do ajuste tem a forma da Equação 4.17, onde k_1 representa o coeficiente de ajuste,

$$E_r = k_1 \left(\frac{V}{\ln\left(\frac{r_e}{r_i}\right)} \right) \quad (4.17)$$

onde E é a intensidade do campo elétrico [Vm^{-1}], V é a tensão aplicada [V], r_e é o raio externo [m] and r_i é o raio do eletrodo interno [m].

4.3.3.2 Temperatura

A temperatura média foi calculada a partir dos valores obtidos nas simulações com as combinações de variáveis da matriz DOE. Da mesma forma que o campo elétrico, o valor de temperatura médio foi obtido por meio de uma ponderação com o volume de cada elemento, conforme mostrado na Equação (4.18),

$$\overline{T_p} = \frac{\sum_{i=1}^{nel} T_i \cdot v_i}{v_l} \quad (4.18)$$

onde $\overline{T_p}$ é a média ponderada da temperatura [K], nel é o número total de elementos no líquido, T_i é o valor de temperatura em cada elemento i [K], v_i é o volume do elemento i [m^3] e v_l é o volume de líquido [m^3].

4.3.3.3 Velocidade do fluido e frequência dos pulsos

Para um escoamento do tipo laminar, a velocidade média do líquido foi calculada para um número de *Reynolds* de 1800, ou seja, 10% menor que o limite de 2000 para escoamento laminar, considerando a menor viscosidade do mesmo. Para o cálculo da velocidade média a partir do número de *Reynolds*, foi utilizado o diâmetro hidráulico da

câmara de tratamento, considerando a seção não circular da área efetiva de tratamento do líquido. O diâmetro hidráulico D_H para a geometria coaxial em questão é dado por:

$$D_H = D_{ext} - D_{int}, \quad (4.19)$$

onde D_{ext} é o diâmetro externo da câmara de tratamento [m] e D_{int} é o diâmetro interno [m]

A partir da Equação 4.13, a velocidade média do fluido na área efetiva de tratamento foi calculada em função do número de *Reynolds* para um escoamento laminar, resultando na Equação 4.20. Para assegurar que o número de *Reynolds* não ultrapasse o valor máximo de 1800 definido para o estudo, a velocidade média foi calculada para o maior valor de diâmetro hidráulico $D_{H_{max}}$, correspondendo ao menor raio do eletrodo interno, e menor valor da viscosidade dinâmica μ_{min} , a qual varia em função da temperatura, conforme mostrado na Tabela 4.4. Considerando a baixa variação da densidade do fluido com a temperatura, foi considerado valor médio da mesma ρ_m para cálculo da velocidade,

$$v_m = \frac{R_e \mu_{min}}{\rho_m D_{H_{max}}} \quad (4.20)$$

onde v_m é a velocidade média [m/s], R_e é o número de *Reynolds* (adimensional), μ_{min} a viscosidade dinâmica mínima do líquido [Pa.s], ρ_m a densidade média [$kg.m^{-3}$] e $D_{H_{max}}$ é o diâmetro hidráulico máximo [m].

A velocidade de entrada do líquido na câmara de tratamento foi obtida por simulações a partir do valor da velocidade média requerida para manter o número de *Reynolds* em 1800. A partir da velocidade de entrada determinada, a vazão mássica do fluido foi calculada numericamente pelo COMSOL^{MR}. O tempo de trânsito do líquido dentro da câmara de tratamento foi obtido a partir da equação de vazão mássica na região efetiva de tratamento(4.21), ou seja, a razão entre a massa do fluido e o tempo de trânsito da região de tratamento, resultando na Equação 4.22, na qual a massa do fluido é expressa em termos da densidade e volume do líquido em tratamento,

$$Q_m = \frac{m}{t_t} \quad (4.21)$$

$$t_t = \frac{\rho v_l}{Q_m} \quad (4.22)$$

onde Q_m a vazão mássica [kg/s], m é a massa do fluido [kg], t_t é o tempo de trânsito [s], ρ a densidade do fluido [kgm^{-3}] e v_l é o volume de líquido dentro da câmara de tratamento [m^3].

O tempo de trânsito do líquido dentro da câmara de tratamento deve ser sincronizado com o período total do trem de pulsos aplicado aos eletrodos para que o fluido receba os pulsos elétricos da fonte de alta tensão durante sua passagem pela região efetiva de tratamento. Desta forma, considerando o tempo de trânsito igual ao tempo de aplicação do trem de pulsos, o período de cada pulso é dado pela Equação 4.23, ou seja, é a razão entre o tempo total de aplicação do trem de pulsos e o número máximo de pulsos. A frequência dos pulsos (f_p) é dada pelo inverso do período de cada pulso, conforme Equação 4.24,

$$T_p = \frac{t_t}{n_m} \quad (4.23)$$

$$f_p = \frac{1}{T_p} \quad (4.24)$$

onde T_p é o período do pulso aplicado [s], t_t é o tempo de trânsito[s], n_m é o número máximo de pulsos e f_p é a frequência dos pulsos [Hz].

Os resultados dos cálculos de pós processamento, considerando as especificidades dos fluidos e microrganismos investigados, são apresentados no Capítulo 5.

4.3.4 Formulação Matemática para o Problema de Otimização Multiobjetivo

De posse dos resultados de campo elétrico obtidos através das simulações computacionais para cada combinação da matriz experimental computacional, um algoritmo de otimização multiobjetivo NSGA-II, extraído de (SESHADRI, 2006), foi utilizado para minimizar a inativação microbiana e densidade de energia, as quais incorporam o campo elétrico médio obtido através de ajuste por regressão não linear. As funções objetivo de taxa de inativação microbiana $\log_{10}S$, baseada no modelo de *Weibull*, e a função de densidade de energia são apresentadas a seguir:

$$f_1 = \log_{10}S(t, E_r) = - \left[\frac{t}{10(A_0 + A_1 E_r + A_2 E_r^2 + A_3 E_r^3)} \right]^{\beta_{av}} \quad (4.25)$$

onde $\log_{10}S$ é a inativação microbiana, S é a taxa de sobrevivência de microrganismos, E_r é o campo elétrico médio ponderado obtido por regressão não linear [Vm^{-1}], t é o tempo de tratamento [s], β_{av} é o coeficiente de forma do modelo de *Weibull* e A_0 a A_3 são os coeficientes da regressão polinomial do modelo de *Weibull*,

$$f_2 = Q_s(t, E_r) = \frac{\sigma(T) E_r^2 \cdot v_l \cdot t}{m} \quad (4.26)$$

onde Q_s é a densidade de energia [J/kg], E_r é o campo elétrico médio ponderado obtido por regressão não linear [Vm^{-1}], t é o tempo de tratamento [s], $\sigma(T)$ é a condutividade elétrica dependente da temperatura [Sm^{-1}] e m é a massa do líquido [kg].

Com o objetivo de ilustrar a variação das funções objetivo em relação ao campo elétrico aplicado e tempo de tratamento, as Figuras 4.12 e 4.13 apresentam a inativação microbiana (f_1) e da densidade de energia (f_2), respectivamente, em função de dados hipotéticos de campo elétrico aplicado na faixa de (10 a 20kV/cm) e tempo de tratamento na faixa de (200 a 300us). A inativação microbiana foi obtida considerando os parâmetros do modelo de *Weibull* (A_0 a A_3 e β) para bactéria *E. coli* em sucos de uva extraídos de (HUANG et al., 2014), os quais serão detalhados no próximo capítulo. Conforme mostrado, a inativação microbiana aumenta à medida que o campo elétrico aplicado e/ou tempo de tratamento aumentam. No ponto de maior inativação microbiana, no qual o campo elétrico é igual a 20kV/cm e tempo de tratamento 300us, a densidade de energia é máxima. Neste ponto, a inativação microbiana é de aproximadamente -1.7 e a densidade de energia próxima de 95kJ/kg. No outro extremo observa-se um efeito dual, no qual o menor valor de densidade de energia e a menor inativação microbiana ocorrem para campo elétrico de 10kV/cm e tempo de tratamento 200us.

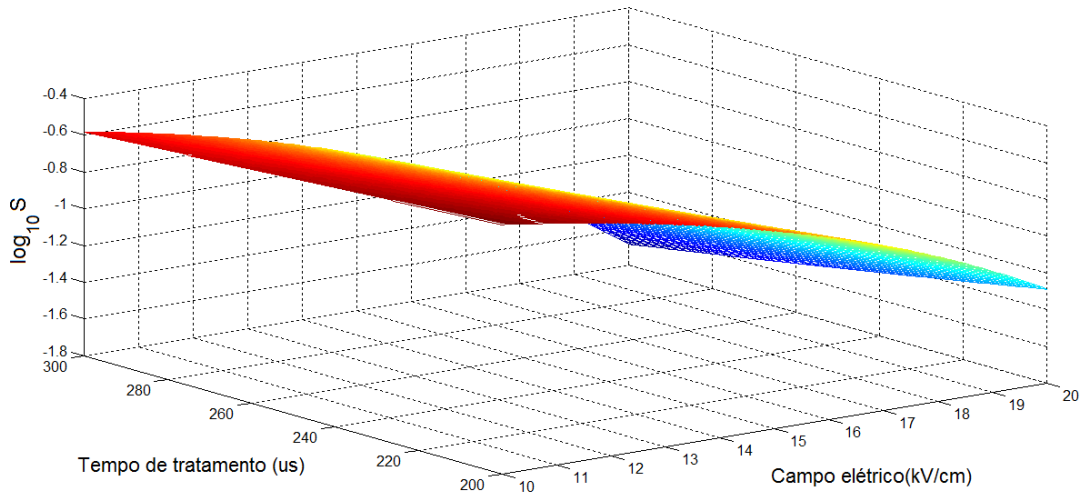


Figura 4.12 – Inativação microbiana em função do campo elétrico aplicado 10 a 20kV/cm e tempo de tratamento 200 a 300us

Considerando as funções f_1 e f_2 , o problema de otimização foi formulado como um modelo não linear, conforme Equação (4.27). O algoritmo de otimização busca minimizar as funções objetivo f_1 e f_2 . Quanto às restrições, o limite superior do tempo de tratamento (t_s) foi especificado considerando o valor máximo do acréscimo de temperatura no líquido de 25°C para a condição de máxima intensidade de campo elétrico, de forma que a temperatura média no líquido não exceda 45°C para uma condição inicial de 20°C, de acordo com a faixa especificada em (QIN et al., 1998). Os limites de tensão aplicada e raio do eletrodo interno foram inseridos como restrições do problema de otimização, observando os limites das faixas de valores apresentados na Tabela 4.5.

No algoritmo de otimização NSGA-II, taxas de cruzamento de 0.9 e de mutação

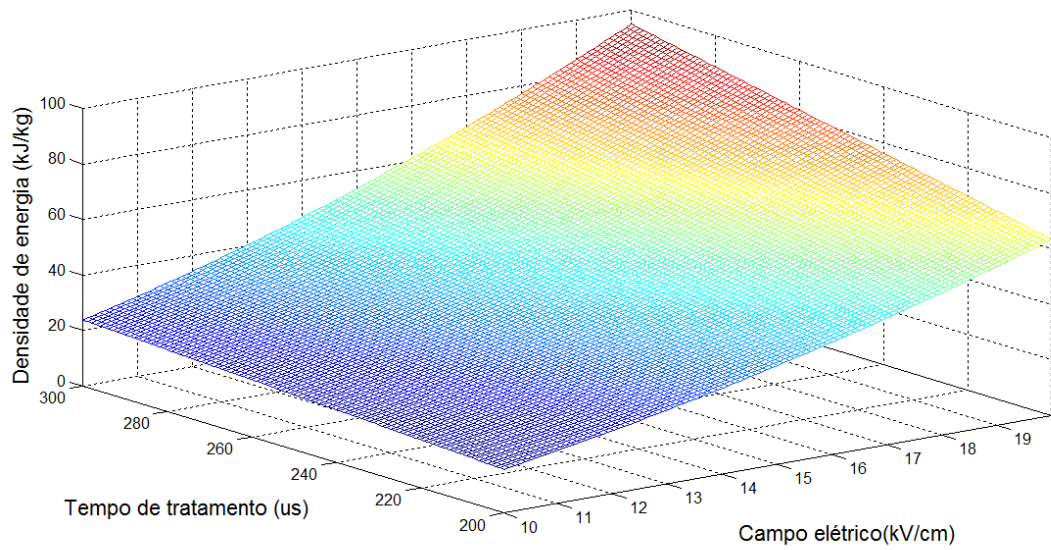


Figura 4.13 – Densidade de energia xem função do campo elétrico aplicado 10 a 20kV/cm e tempo de tratamento 200 a 300us

de 0.1 foram aplicados para garantir a convergência e manter a diversidade das soluções em gerações subsequentes, respectivamente. A população inicial foi configurada para 100 indivíduos,

$$\begin{aligned} & \min(f_1, f_2) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 16 \leq V \leq 24kV \\ t_i \leq t \leq t_s \\ 0.5 \leq r_i \leq 1cm \end{cases} \end{aligned} \quad (4.27)$$

A partir da análise das Figuras 4.12 e 4.13, referentes as funções de inativação microbiana e densidade de energia, observa-se que as mesmas são contínuas, suaves e definidas em todos os pontos, o que possibilitaria a sua diferenciação em qualquer ponto do domínio definido. Assim, um algoritmo determinístico seria uma alternativa plausível para a solução do problema de otimização. Porém, diante do desconhecimento da complexidade dessas funções no início do trabalho, em virtude das diferentes possibilidades de geometrias de câmaras de tratamento, variáveis e suas restrições, optou-se por utilizar um algoritmo de otimização evolutivo (NSGA-II), considerando que este não depende da continuidade e convexidade das funções objetivo.

Adicionalmente, tendo em vista que pretende-se dar continuidade ao trabalho utilizando outras geometrias de câmaras de tratamento, as quais podem resultar em funções descontínuas de inativação microbiana e densidade de energia em função da distribuição de campo elétrico, além da incorporação de estudos de fluidodinâmica com

escoamento turbulento, o que aumentaria a complexidade computacional do modelo acoplado, optou-se por manter o algoritmo NSGA-II, considerando sua robustez para a solução de problemas envolvendo funções descontínuas e não-convexas.

4.4 Considerações Finais

O modelo computacional apresentado para sistemas estáticos permite a geração de soluções ótimas aproximadas a partir de cálculo da distribuição de campo e pós processamento dos resultados utilizando algoritmo implementado no MatLab^{MR}, associado com algoritmo de otimização multiobjetivo NSGA-II capaz de gerar as melhores soluções de inativação microbiana e densidade de energia, visando a minimização das funções objetivo. Este modelo foi utilizado para simulações em três geometrias de eletrodos. Os principais resultados utilizando este modelo, incluindo a comparação entre as curvas Pareto para as geometrias utilizadas, serão apresentados no próximo capítulo.

O modelo computacional para sistemas dinâmicos foi desenvolvido com o pacote comercial multifísico COMSOL^{MR} associado com o algoritmo de otimização mutiobjetivo NSGA-II, sendo aplicado a uma geometria coaxial. O modelo dinâmico agrega a análise térmica e de escoamento do fluido em relação ao modelo estático, permitindo restringir o tempo de tratamento especificado em função da faixa de temperatura considerada, além de sincronizar a frequência dos pulsos aplicados com o tempo de trânsito do líquido dentro da câmara de tratamento, ou seja, é um modelo mais próximo de um sistema real de tratamento utilizando a tecnologia PEF. O cálculo do campo elétrico é realizado no modelo estático, considerando que o transitório do pulso de tensão não afeta significativamente o a densidade de corrente. Considerando que a eficiência do tratamento de um sistema PEF depende da resistência intrínseca do microrganismo ao tratamento e das propriedades físico-químicas do fluido, o modelo computacional dinâmico será aplicado a diferentes tipos de microrganismos, diferentes tipos de líquidos e sistemas de múltiplos estágios em estudos de caso apresentados no próximo capítulo. Além disso, os modelos de predição de *Hulsheger e Niemman* e de *Weibull* serão comparados, de forma a avaliar o uso da ferramenta computacional em função do modelo de predição utilizado.

De posse de um determinado conjunto de soluções ótimas aproximadas obtidas através da metodologia computacional, a solução adotada dependerá das especificações requeridas para um determinado processo em termos da inativação microbiana para um determinado líquido/microrganismo e da densidade de energia, os quais podem ser alcançados em função do ajuste das variáveis de projeto. Desta forma, a metodologia permite a um projetista de uma câmara de tratamento uma visão prévia do comportamento destes dois parâmetros e uma melhor compreensão do problema, em busca de um sistema mais eficiente. Considerando a relevância dos mesmos para um sistema PEF, esta ferramenta

computacional é capaz de contribuir para o processo de desenvolvimento de câmaras de tratamento, através de ajustes das variáveis dimensionais e da fonte de alta tensão de forma a obter a eficiência global requerida para a aplicação.

5 Resultados e Análise

5.1 Introdução

Este capítulo apresenta os resultados obtidos através das simulações utilizando os modelos computacionais apresentados no Capítulo 4. A tabela 5.1 mostra a organização dos resultados. Inicialmente, são apresentados resultados para sistemas estáticos, com a comparação da eficiência entre três arranjos de eletrodos. A seguir, são apresentados os resultados das simulações em sistemas dinâmicos utilizando o software COMSOL^{MR}, com análise da distribuição de campo elétrico, escoamento do fluxo (laminar), análise térmica e os resultados de pós-processamento da matriz experimental computacional. Finalmente, são abordados quatro estudos de caso para sistemas dinâmicos visando a aplicação do modelo em diferentes tipos de carga, ou seja, microrganismos e líquidos, sistemas com mais de um estágio e diferentes modelos de predição.

Tópico	Resultados
Sistema Estático	- Fatores e níveis do planejamento experimental - Distribuição de campo elétrico - Planejamento experimental e ajustes por regressão - Comparativo de curvas Pareto estimadas - Comparativo dos resultados entre COMSOL^{MR} e MatLab^{MR}
Sistema Dinâmico	- Distribuição de campo elétrico - Análise do escoamento do fluido - Análise térmica - Resultados pós-processamento
Estudo de Casos	- Comparativo entre diferentes microrganismos em sucos de uva - Comparativo entre diferentes tipos de suco - Sistemas multi-estágios - Comparativo entre diferentes modelos de predição

Tabela 5.1 – Organização dos resultados

5.2 Resultados para Sistemas Estáticos

Essa seção apresenta os principais resultados obtidos em câmaras de tratamento estáticas, incluindo a distribuição de campo elétrico e as curvas Pareto estimadas obtidas pelo modelo computacional apresentado na Seção 4.2. O modelo foi aplicado em simulações numéricas utilizando câmaras de tratamento estáticas para fins de comparação da eficiência global de três arranjos de eletrodos inseridos em uma câmara de tratamento cilíndrica (Figura 5.1) contendo líquido genérico de condutividade $0.2S/m$. A análise térmica não foi considerada.

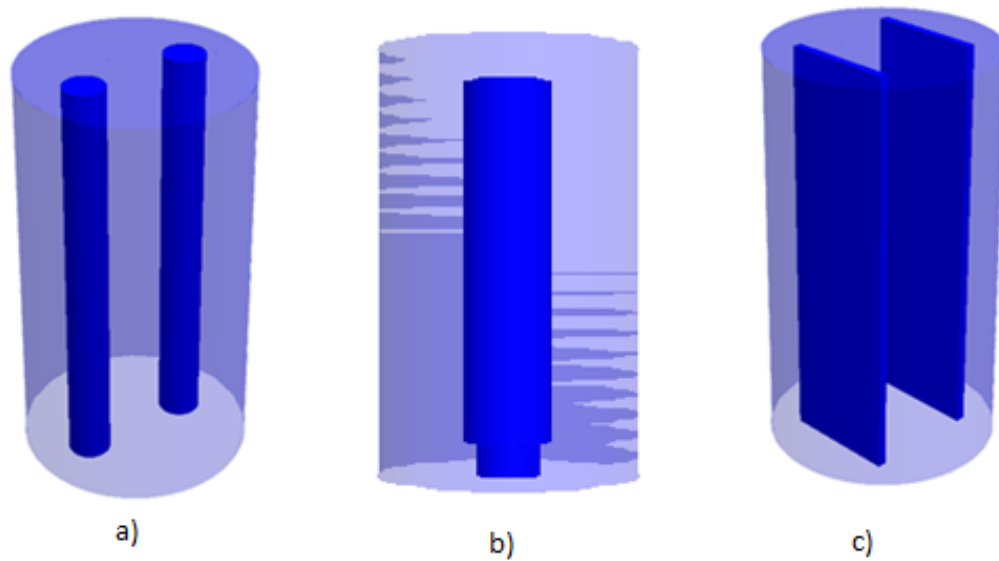


Figura 5.1 – Geometrias de eletrodos aplicadas às simulações computacionais: a) Geometria com eletrodos cilíndricos tipo "agulha" b) Geometria coaxial com isolador c) Geometria com eletrodos planos paralelos

5.2.1 Fatores e Níveis do Planejamento Experimental

Os fatores e níveis do planejamento experimental 3^3 (3 níveis e 3 fatores) para as três geometrias de eletrodos são apresentados nas Tabelas 5.2 (eletrodos cilíndricos), 5.3 (arranjo coaxial) e 5.4 (eletrodos planos paralelos). Para cada geometria, uma característica dimensional foi selecionada para o estudo, conforme segue: raio dos eletrodos (r) (arranjo com eletrodos cilíndricos), raio do eletrodo interno (r_i) (arranjo coaxial) e distância entre eletrodos (d) (arranjo com eletrodos planos paralelos).

O limite superior da tensão aplicada e os dados dimensionais para cada arranjo foram especificados de forma que o campo elétrico máximo no interior da câmara de tratamento não ultrapassasse o valor de $50kV/cm$, considerando a faixa da variável dimensional utilizada em cada geometria. O limite inferior da tensão aplicada estabelecido foi de 40% do valor da tensão máxima, sendo este percentual aplicado também aos demais casos deste estudo preliminar. Para todas as configurações, o número de pulsos foi parametrizado em 3 níveis (5, 505 e 1005 pulsos), para uma duração do pulso de $10\mu s$. Como a análise térmica não foi considerada nas simulações para sistemas estáticos, o tempo de tratamento não foi limitado pela temperatura do líquido.

5.2.2 Distribuição de Campo Elétrico

As distribuições de campo elétrico obtidas por meio do algoritmo de elementos finitos para cada configuração de eletrodo são mostradas nas Figuras 5.2 a 5.4 (corte na região central da câmara de tratamento) para a combinação de valores de tensão aplicada e

Fator	Unidade	Nível		
		-	0	+
Tensão aplicada (V)	kV	9.6	16.8	24
Número de pulsos (n)	-	5	505	1005
Raio dos eletrodos (r)	mm	2.2	2.6	3.0

Tabela 5.2 – Fatores e respectivos níveis do planejamento experimental para geometria de eletrodos cilíndricos tipo "agulha"

Fator	Unidade	Nível		
		-	0	+
Tensão aplicada (V)	kV	3.2	5.6	8.0
Número de pulsos (n)	-	5	505	1005
Raio do eletrodo interno (r_i)	mm	4	6	8

Tabela 5.3 – Fatores e respectivos níveis do planejamento experimental para geometria coaxial

Fator	Unidade	Nível		
		-	0	+
Tensão aplicada (V)	kV	8	14	20
Número de pulsos (n)	-	5	505	1005
Distância entre eletrodos (d_e)	mm	8	12	16

Tabela 5.4 – Fatores e respectivos níveis do planejamento experimental para geometria de eletrodos planos paralelos

dimensional do arranjo que geram uma distribuição de campo elétrico de maior intensidade. A Figura 5.2 apresenta a distribuição de campo elétrico para o arranjo de eletrodos cilíndricos para uma tensão aplicada de $24kV$ e raio dos eletrodos de $3mm$. Observa-se uma intensificação das magnitudes do campo elétrico na região entre os eletrodos e uma região de enfraquecimento de campo elétrico atrás dos eletrodos, o que dificulta a eliminação de microrganismos nesta região da câmara. A Figura 5.3 apresenta a distribuição de campo elétrico o arranjo coaxial considerando uma tensão aplicada de $8kV$ e raio do eletrodo interno de $8mm$. Para este arranjo, o campo elétrico é relativamente homogêneo na região de tratamento, com valores entre 18 e $22kV/cm$. A Figura 5.4 mostra a distribuição de campo elétrico para a geometria com eletrodos planos paralelos para uma tensão aplicada de $20kV$ e *gap* entre eletrodos de $8mm$. Apesar de uma boa uniformidade da distribuição de campo elétrico entre as placas, observa-se um enfraquecimento de campo elétrico atrás das placas, o que não favorece a eliminação de microrganismos nestas regiões, impactando negativamente nos resultados de inativação microbiana.

5.2.3 Planejamento Experimental e Ajustes por Regressão

A partir dos níveis e fatores apresentados para cada arranjo de eletrodos, as matrizes de planejamento experimental com 27 combinações das variáveis (planejamento fatorial

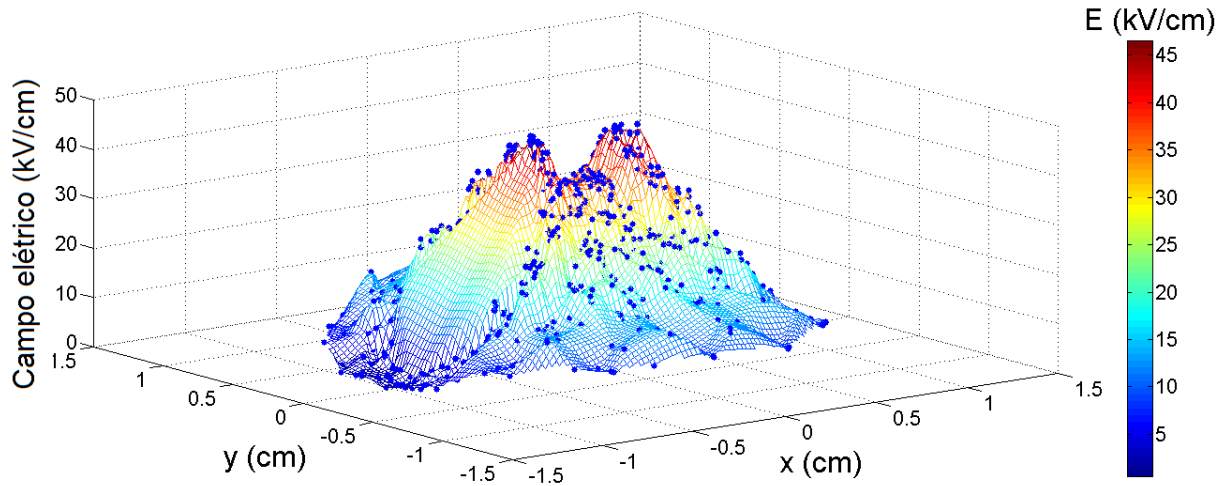


Figura 5.2 – Distribuição de campo elétrico na região central- eletrodos cilíndricos

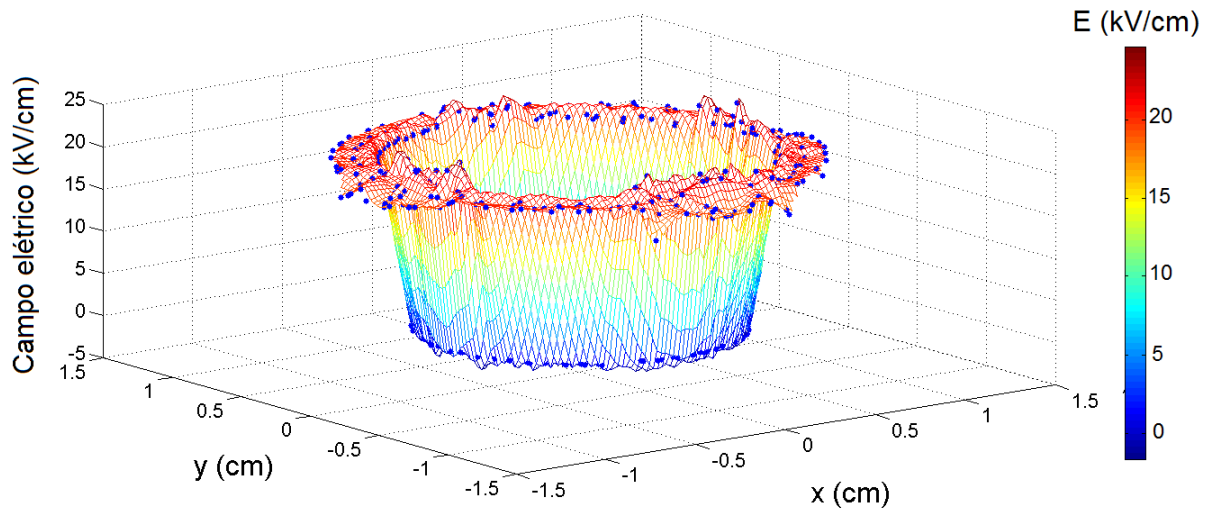


Figura 5.3 – Distribuição de campo elétrico na região central - arranjo coaxial

3³) foram definidas para cada arranjo. Para cada combinação de variáveis, os resultados de inativação microbiana, densidade de energia e campo elétrico máximo foram obtidos. Baseado nos resultados das matrizes de planejamento experimental, as funções objetivo de inativação microbiana (I_r) e densidade de energia (Q_{sr}) para cada arranjo foram expressas em termos de modelos de regressão polinomial de segunda ordem, utilizando a função *rsm* do MatLab[®].

Os resultados da matriz de planejamento experimental e dos ajustes de regressão estão disponíveis no Apêndice C.

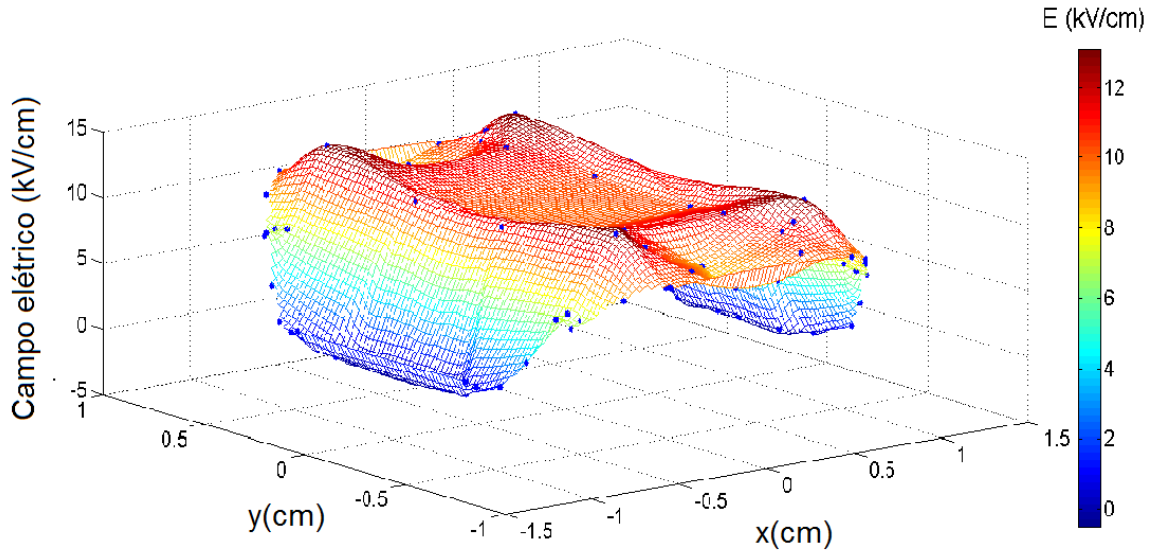


Figura 5.4 – Distribuição de campo elétrico na região central - eletrodos planos paralelos

5.2.4 Comparação das Curvas Pareto Estimadas

As curvas Pareto estimadas geradas pelo algoritmo de otimização multiobjetivo NSGA-II para cada geometria basearam-se na formulação matemática do problema de otimização multiobjetivo para sistemas estáticos apresentada na Seção 4.2.3, visando a minimização das funções objetivo de inativação microbiana (I_r) e densidade de energia (Q_{sr}), com as restrições particulares de cada caso, baseadas nos limites apresentados na Tabela 5.2 (eletrodos cilíndricos), Tabela 5.3 (arranjo coaxial) e Tabela 5.4 (eletrodos planos paralelos). A restrição da função objetivo de densidade de energia foi inserida de forma a atender a faixa de densidade da aplicação entre 50 a 5040 kJ/kg (LOEFFLER, 2006). As formulações matemáticas para o problema de otimização multiobjetivo dos arranjos com eletrodos cilíndricos, coaxial e planos paralelos, são apresentadas nas equações 5.1, 5.2 e 5.3, respectivamente:

$$\begin{aligned} & \min(I_r, Q_{sr}) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 9.6 \leq V \leq 24kV \\ 50 \leq t \leq 1050us \\ 2.2 \leq r \leq 3mm \\ 50 \leq Q_{sr} \leq 5040kJ/kg, \end{cases} \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} & \min(I_r, Q_{s_r}) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 3.2 \leq V \leq 8.0kV \\ 50 \leq t \leq 1050us \\ 4 \leq r_i \leq 8mm \\ 50 \leq Q_{s_r} \leq 5040kJ/kg, \end{cases} \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} & \min(I_r, Q_{s_r}) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 8 \leq V \leq 20kV \\ 50 \leq t \leq 1050us \\ 8 \leq d_e \leq 16mm \\ 50 \leq Q_{s_r} \leq 5040kJ/kg, \end{cases} \end{aligned} \quad (5.3)$$

A Figura 5.5 apresenta um gráfico comparativo das curvas Pareto estimadas entre as três geometrias abordadas. Os resultados mostraram uma melhor resposta da geometria coaxial em termos de inativação microbiana e densidade de energia, considerando que é possível alcançar níveis de inativação microbiana da ordem de $\log S = -6$ para uma densidade de energia de aproximadamente $750kJ/kg$. Para esta mesma densidade de energia, a geometria com eletrodos planos paralelos e cilíndricos apresentam taxas de inativação microbiana de aproximadamente $\log S = -0.8$. As inativações mais baixas para estas geometrias são justificadas pela existência de zonas com magnitudes de campo elétrico de baixa intensidade como, por exemplo, a região atrás das placas na configuração de eletrodos plano paralelos. Por outro lado, a homogeneidade na distribuição de campo elétrico observada na distribuição coaxial favorece a eficiência do tratamento do ponto de vista de inativação microbiana. Conforme podemos observar no gráfico comparativo, as curvas de Pareto estimadas para as geometrias com eletrodos cilíndricos e planos paralelos apresentam um comportamento similar até o valor de densidade de energia de aproximadamente $1700kJ/kg$. Ressalta-se que as curvas Pareto estimadas apresentadas neste comparativo, assim como as demais curvas Pareto apresentadas no decorrer do trabalho, se referem à uma única execução do algoritmo NSGA-II. De forma a considerar a característica estocástica do método, foram realizadas simulações com até 10 execuções do algoritmo NSGA-II para as curvas Pareto estimadas, não sendo observadas alterações significativas nos resultados.

Diante dos melhores resultados obtidos para a geometria coaxial, a mesma foi utilizada como base para a geometria utilizada nas simulações em sistemas dinâmicos.

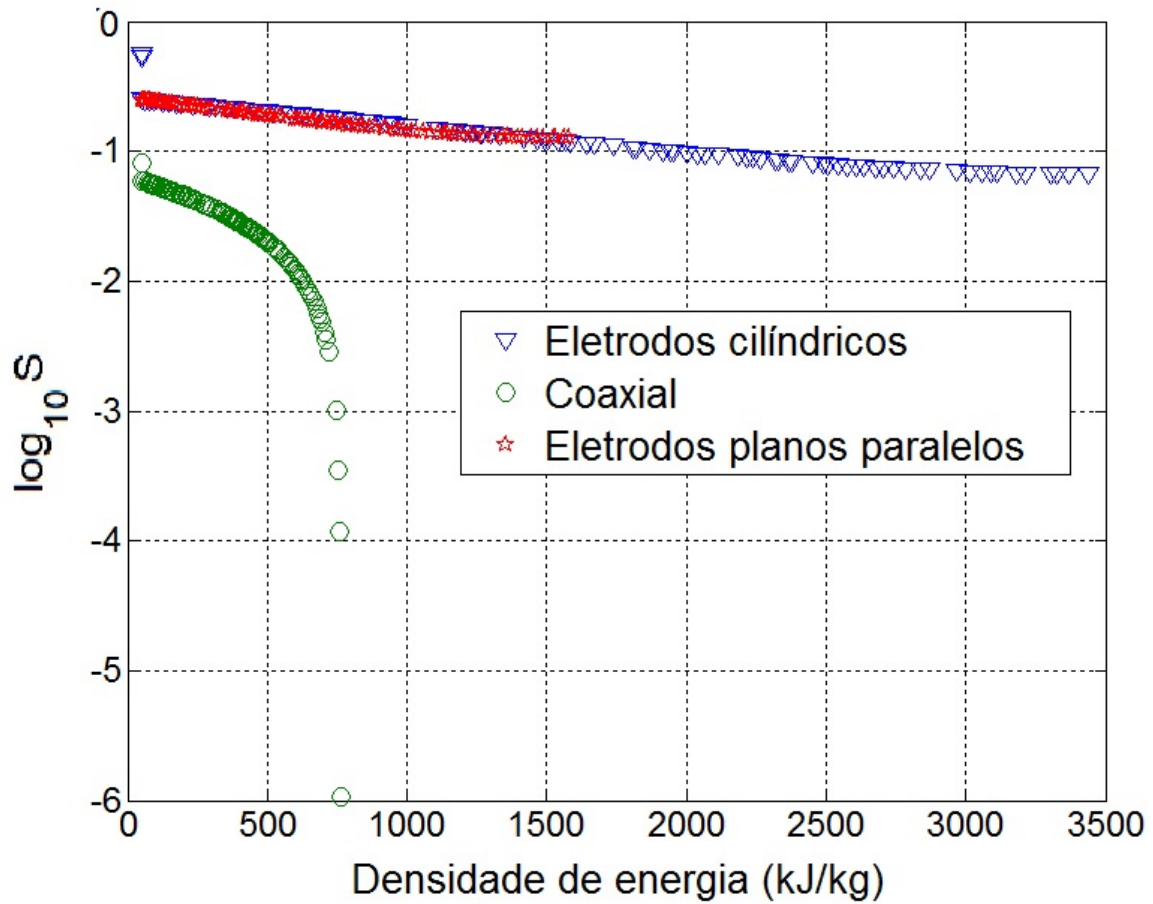


Figura 5.5 – Comparativo entre curvas Pareto estimadas para diferentes arranjos de eletrodos (sistema estático)

5.2.5 Comparativo dos Resultados entre COMSOL^{MR} e MatLab^{MR}

A magnitude da distribuição de campo elétrico médio ponderado obtido em simulações com câmara de tratamento estática utilizando algoritmo implementado no MatLab^{MR} foi comparada com o campo elétrico obtido através do COMSOL^{MR} para um arranjo coaxial em função do raio do eletrodo interno variando entre 0.2 e 0.8cm, considerando uma mesma tensão aplicada de 8kV. Para ambos os casos, foi configurada uma malha com aproximadamente 6000 elementos volumétricos. Conforme a figura 5.6, as magnitudes do campo elétrico tiveram uma aproximação aceitável.

Considerando as curvas de campo elétrico apresentadas, para um tempo de tratamento hipotético de 200us e aplicação em suco de uva contendo a bactéria *E. coli*, a diferença entre as magnitudes do campo elétrico para o COMSOL^{MR} e MatLab^{MR} resulta em uma diferença de inativação microbiana (modelo de Weibull) de 9×10^{-3} , representando cerca 3.1% em relação ao valor calculado para o COMSOL^{MR}, o que significa uma aproximação aceitável para a inativação microbiana.

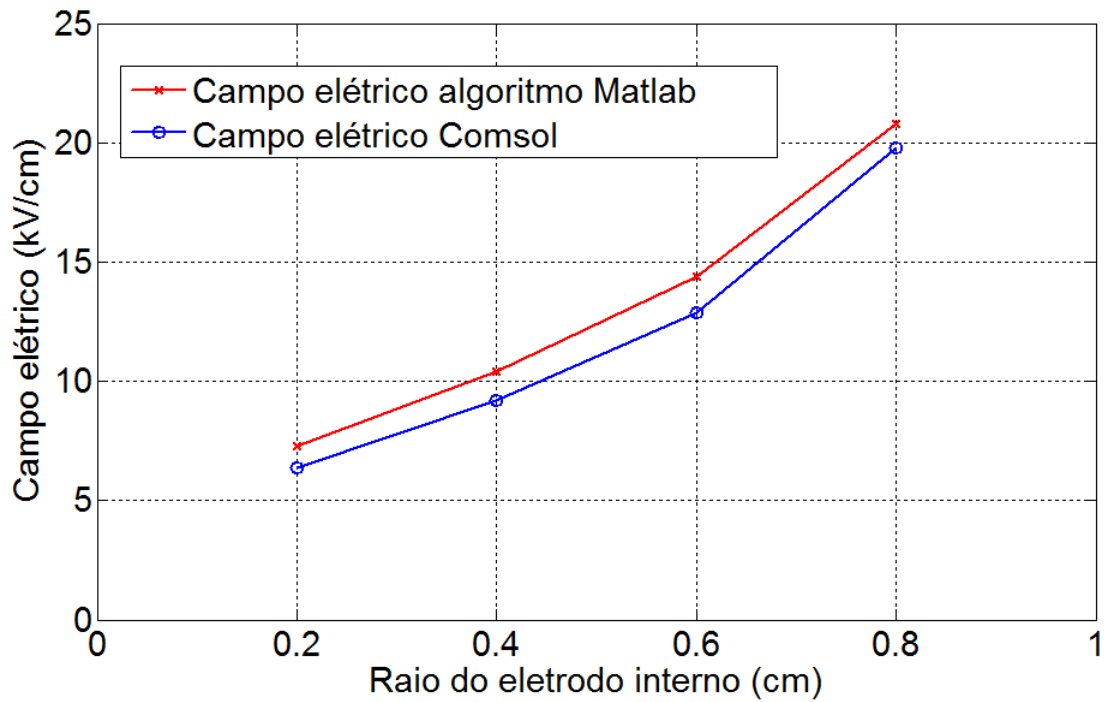


Figura 5.6 – Comparativo entre magnitudes do campo elétrico obtidas através do algoritmo implementado em MatLab^{MR} e pelo COMSOL^{MR}

5.3 Resultados para Sistemas Dinâmicos

A análise do sistema dinâmico com a geometria coaxial foi realizada através do software COMSOL^{MR}, aplicando a metodologia computacional abordada na Seção 4.3. Neste item, são apresentados resultados da distribuição de campo elétrico, escoamento do fluido e temperatura, além dos resultados de pós processamento obtidos com a matriz de planejamento experimental e ajustes por regressão.

5.3.1 Distribuição de Campo Elétrico

Conforme abordado na Seção 3.3.1, o campo elétrico é calculado numericamente pelo método dos elementos finitos a partir dos potenciais obtidos na malha. A Figura 5.7 mostra cortes no plano xy da distribuição de potenciais na região efetiva de tratamento da câmara, considerando uma tensão aplicada de $24kV$ e raio do eletrodo interno de $1cm$. Observa-se uma simetria na distribuição de potenciais ao longo do plano z da câmara, com decréscimo dos valores de potencial na direção ao eletrodo externo.

Uma visão 3D da distribuição de campo elétrico dentro da câmara de tratamento é apresentada na Figura 5.8 para esta mesma configuração ($V = 24kV$ e $r_i = 1cm$, a qual representa a combinação que gera um campo elétrico de maior intensidade. Os anéis equalizadores toroidais juntamente com os isoladores foram inseridos na câmara de tratamento para minimizar a intensidade do campo elétrico em torno das bordas do

eletrodo interno. Para a configuração mencionada, a intensidade do campo elétrico é de $48.2kV/cm$ próximo à superfície dos anéis toroidais (superior e inferior). A magnitude do campo elétrico é maior próximo à superfície do eletrodo interno e decresce em direção à superfície do eletrodo externo, sendo um comportamento esperado para uma geometria coaxial. O campo elétrico médio ponderado de $21.4kV/cm$ foi calculado através da Equação 4.14 para a condição analisada. O campo elétrico médio ponderado também foi calculado para os raios de eletrodo de $0.5cm$ e $0.75cm$, considerando a mesma tensão aplicada de $V = 24kV$, resultando em valores 35,6% e 19,2% menores em relação ao raio de $1cm$, respectivamente. O aumento do campo elétrico médio à medida que o raio do eletrodo interno aumenta favorece a inativação microbiana, porém aumenta o consumo energético do sistema.

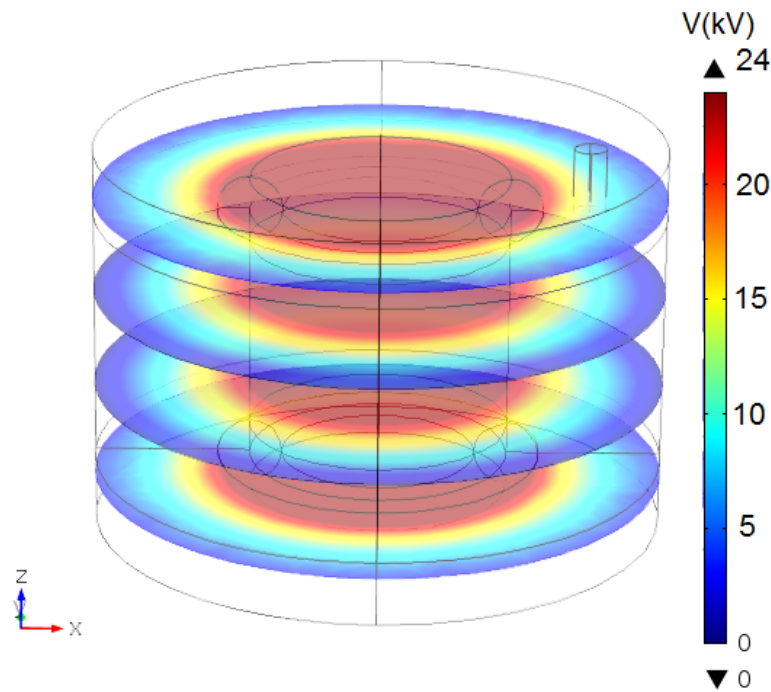


Figura 5.7 – Cortes no plano xy da distribuição de potenciais na câmara de tratamento para $V = 24kV$ e $r_i = 1cm$

Além da magnitude do campo elétrico ser relevante para a inativação de microrganismos em um determinado líquido, respeitando o limite de campo elétrico máximo do mesmo, a uniformidade da distribuição de campo elétrico contribui para que ocorra uma distribuição homogênea da inativação em todo o volume de líquido contido na câmara de tratamento. A Figura 5.9 mostra o coeficiente de variação CV e o campo elétrico médio ponderado como uma função do raio do eletrodo interno para uma tensão aplicada de $24kV$. Conforme mostrado, o valor do CV decresce à medida que o raio do eletrodo interno aumenta, indicando uma maior uniformidade da distribuição de campo elétrico para valores maiores de r_i . Considerando uma variação de raio do eletrodo interno de 0.5 a $1cm$, há uma significativa redução do CV em 41,6%, indicando uma melhoria na uniformidade do campo

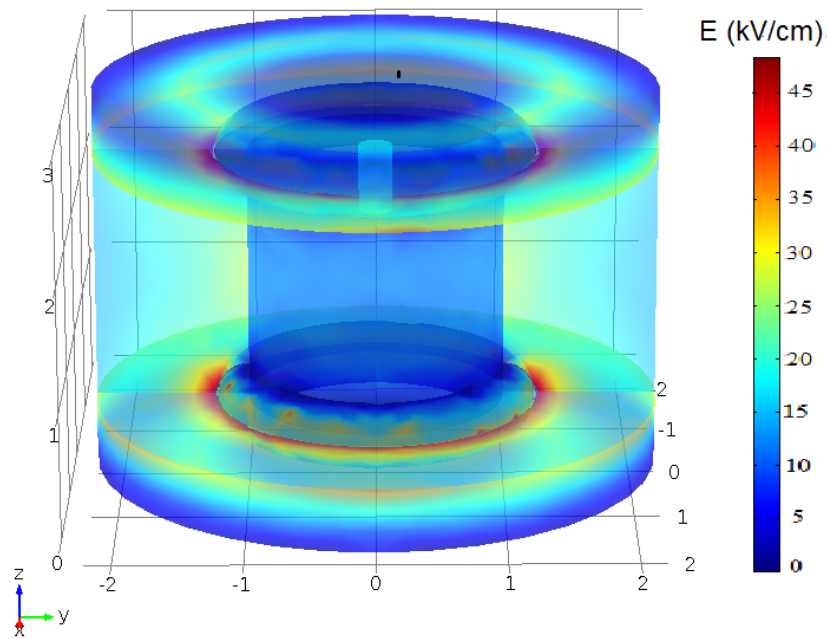


Figura 5.8 – Visão 3D da distribuição de campo elétrico para $V = 24kV$ e $r_i = 1cm$

elétrico para valores maiores de r_i . Contudo, conforme já mencionado, um aumento no raio do eletrodo interno também aumenta o consumo energético, o que tem um relevante impacto no custo de um sistema PEF, além de reduzir a capacidade do sistema.

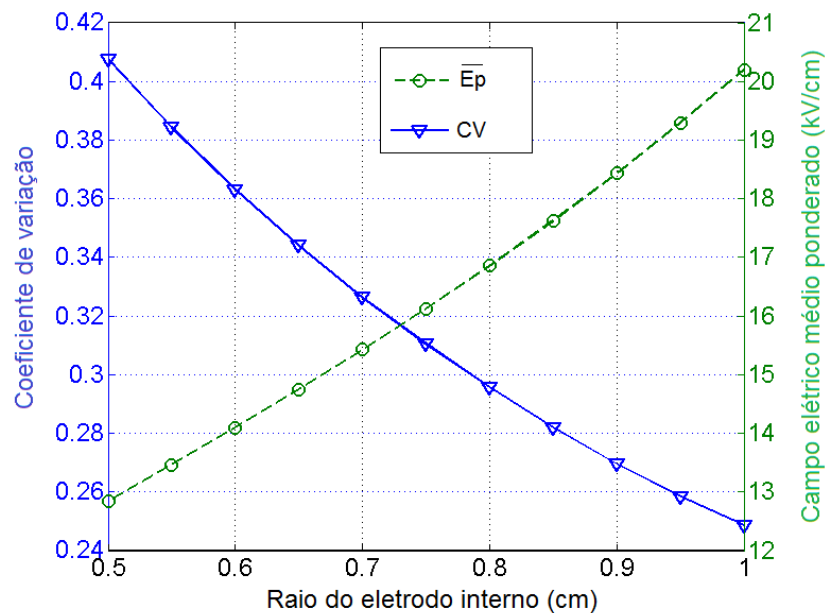


Figura 5.9 – Coeficiente de variação e valor médio ponderado do campo elétrico como função do raio do eletrodo interno para uma tensão aplicada de 24kV

Os resultados desta seção mostraram a importância da análise de campo elétrico para um sistema PEF, tanto do ponto de vista microbiológico, como também pelo consumo energético e homogeneidade do tratamento dentro da câmara. Assim sendo, a especificação

adequada das variáveis que impactam na distribuição de campo (tensão aplicada e raio do eletrodo interno) são essenciais para obter a eficiência do tratamento requerida para um determinado sistema.

5.3.2 Análise do Escoamento do Fluido

A Figura 5.10 mostra as distribuições 3D da magnitude da velocidade e da pressão para o líquido modelado como suco de uva. Na região efetiva de tratamento, tanto a velocidade quanto a pressão têm uma distribuição bastante homogênea, o que é característico do fluxo laminar. As magnitudes da velocidade nos orifícios de entrada e saída do líquido na câmara de tratamento são maiores devido às menores áreas de secção, alcançando valor da ordem de 2.67m/s na região de entrada do líquido na região efetiva de tratamento, devido à pequena zona de turbulência do líquido nesta região. O maior valor de pressão (1.08atm) ocorre na entrada do líquido, para uma condição de contorno estabelecida na saída do líquido igual a 1atm . Conforme apresentado na Figura 5.11, a qual mostra a velocidade do líquido em função de x a partir da superfície do eletrodo interno para uma distância de 0.1cm abaixo do isolador superior, a velocidade atinge valor máximo de aproximadamente 2.5m/s próximo à superfície de entrada da câmara de tratamento ($x = 1.7\text{cm}$).

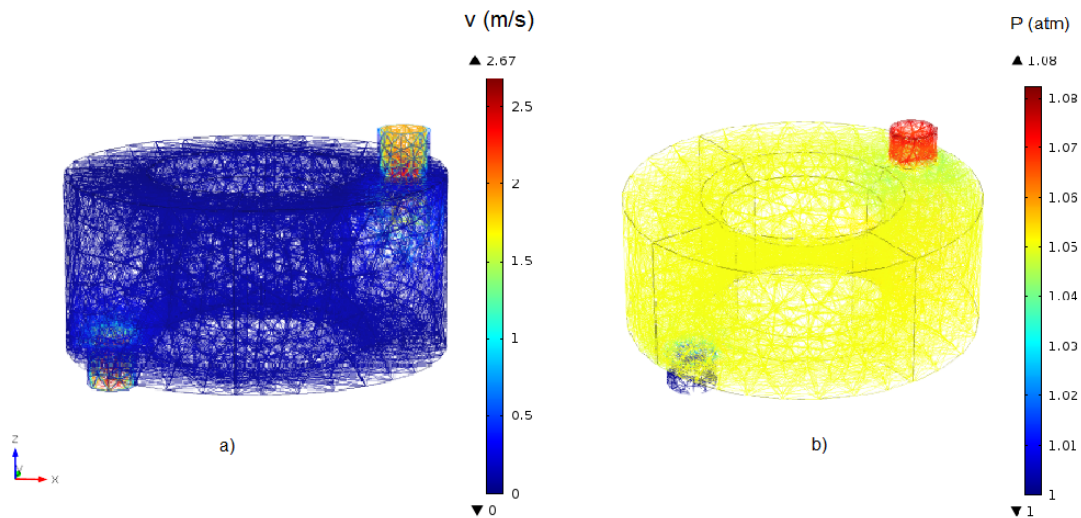


Figura 5.10 – Gráficos 3D: a) Distribuição de velocidade; b) Distribuição de pressão

A Figura 5.12 apresenta em corte a magnitude das velocidades na região central da câmara de tratamento ($z = 1.5\text{cm}$), com valores consideravelmente mais baixos em relação às magnitudes da velocidade próximo à superfície do isolador superior. A maior velocidade do líquido no plano central da câmara de tratamento ($v = 0.59\text{m/s}$) ocorre na direção da entrada do líquido na câmara, no qual nota-se, no plano central analisado, um reflexo da pequena turbulência gerada no orifício de entrada.

O tempo de trânsito do líquido dentro da câmara de tratamento deve estar sincronizado com a frequência dos pulsos da fonte de alta tensão de forma que o fluido, ao passar

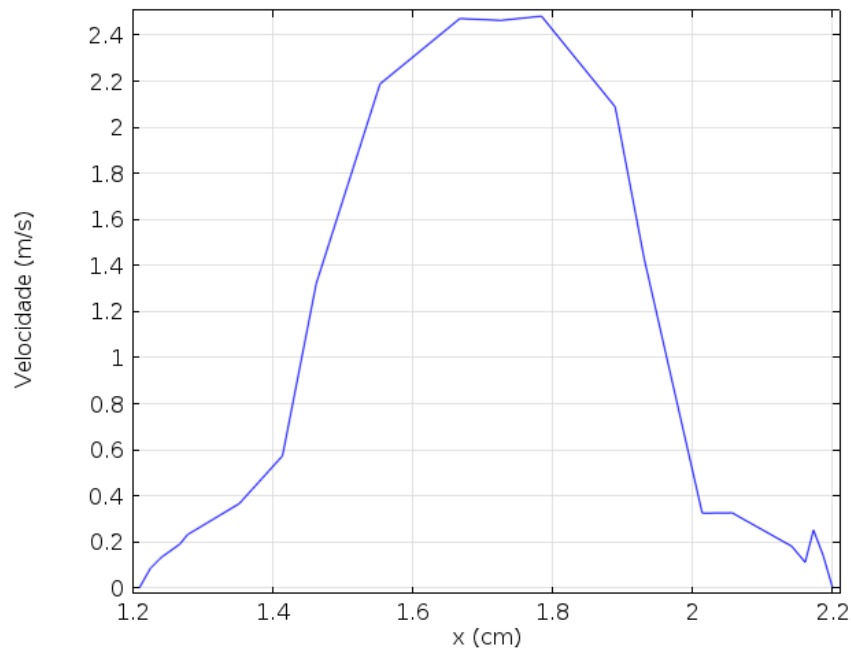


Figura 5.11 – Módulo da velocidade em função da coordenada x para 0.1cm abaixo do isolador superior

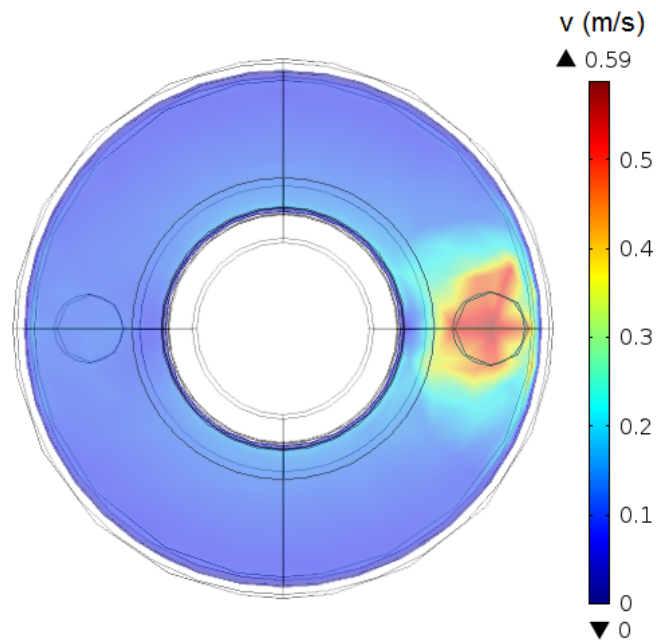


Figura 5.12 – Vista superior (em corte) da distribuição do módulo da velocidade na parte central da câmara de tratamento

pela câmara de tratamento, seja submetido a todos os pulsos elétricos parametrizados para uma determinada aplicação. Em estudos com simulações numéricas que incorporam a fluidodinâmica, tal como em (BUCKOW et al., 2010) e (KNOERZER; BAUMANN; BUCKOW, 2012), não há um detalhamento dos cálculos das vazões e frequências utilizadas, o que dificulta a compreensão dos dados de simulação reportados. Desta forma, as equações apresentadas na Seção 4.3.3.3 e os cálculos apresentados nesta seção são relevantes para

justificar os dados de escoamento e frequência utilizados nos estudos computacionais.

Para o cálculo da velocidade média do líquido (Equação 4.20) na área efetiva de tratamento dentro da câmara para os dois tipos de sucos abordados no estudo (uva e laranja), foram calculados inicialmente os parâmetros μ_{min} (viscosidade dinâmica mínima) e ρ_m (densidade média) para cada tipo de suco. Os valores de μ_{max} foram obtidos para a maior temperatura do fluido (45 °C) e grau Brix $B_x=13$ (valor típico para sucos não concentrados). A densidade média de cada suco (ρ_m) foi calculada para um valor de matéria seca do suco (X)=30, sendo obtida como a média da densidade para os valores mínimo e máximo de temperatura. A Tabela 5.5 apresenta os resultados encontrados.

Parâmetro	Unidade	Suco de uva	Suco de laranja
μ_{min}	<i>mPa.s</i>	0.89	1.19
ρ_m	<i>kg/m³</i>	1261	1103

Tabela 5.5 – Viscosidade dinâmica mínima e densidade média para sucos de uva e laranja

A Tabela 5.6 resume os resultados dos parâmetros de escoamento obtidos para os raios dos eletrodos de 0.5cm e 1.0cm em cada tipo de suco. Conforme a Equação 4.20, a velocidade do fluido (v_m) é definida em função do diâmetro hidráulico máximo da câmara, o qual corresponde ao menor raio do eletrodo interno utilizado ($r_i = 0.5cm$). Considerando as propriedades específicas de cada suco e o maior valor de diâmetro hidráulico (3.4cm), para um número de *Reynolds* máximo de 1800 definido para o estudo, foi obtida uma velocidade média para o suco de uva igual a 3.7cm/s e para o suco de laranja de 5.7cm/s. Para manter a característica laminar do fluxo, independente do raio do eletrodo para cada tipo de suco e, conseqüentemente, manter a mesma velocidade média dentro da região efetiva de tratamento, resultando em uma mesma frequência para o trem de pulsos para um mesmo tipo de suco, optou-se por variar a velocidade de entrada do fluido v_{ent} na parametrização do COMSOL^{MR} em função do raio utilizado. Para o raio de eletrodo 1cm, o número de *Reynolds* obtido foi de 1258 em ambos sucos, ou seja, mantendo o escoamento laminar.

Conforme abordado na Seção 4.3.3.3, de posse dos valores das velocidades médias, a vazão mássica do fluido foi calculada numericamente pelo COMSOL^{MR}. Considerando a mesma velocidade média para cada tipo de suco, a vazão mássica é maior para o raio de 0.5cm em relação ao raio de 1cm, já que o diâmetro hidráulico é maior à medida que o raio diminui, resultando em uma maior área de seção hidráulica. Observa-se ainda que, para um mesmo valor de raio do eletrodo interno, a vazão mássica é maior para o suco de laranja, em função da maior velocidade média para este tipo de suco.

A partir dos resultados de vazão mássica obtidos para cada tipo de suco/raio de eletrodo, as equações 4.22, 4.23 e 4.24 foram utilizadas para calcular o tempo de trânsito (t_t) do líquido dentro da câmara, o período de cada pulso (T_p) e a frequência dos pulsos

Suco de uva				
$r_i(cm)$	$v_m(cm/s)$	$v_{ent}(cm/s)$	$Re(Reynolds)$	$Q_m(kg/h)$
0.5	3.73	225.1	1800	248.4
1.0	3.73	190.0	1268	205.2
Suco de laranja				
$r_i(cm)$	$v_m(cm/s)$	$v_{ent}(m/s)$	$Re(Reynolds)$	$Q_m(kg/h)$
0.5	5.71	300.0	1800	295.2
1.0	5.71	260.1	1268	244.8

Tabela 5.6 – Resultados dos parâmetros de escoamento para sucos de uva e laranja para diferentes raios do eletrodo interno

(f_p), respectivamente. Os resultados para cada tipo de suco são apresentados na Tabela 5.7, na qual observa-se que o tempo de trânsito e, conseqüentemente, o período de cada pulso são menores para o suco de laranja. Desta forma, levando em consideração que o suco de laranja, em função das suas propriedades, escoar mais rapidamente pela área efetiva de tratamento na câmara, a frequência dos pulsos para tratamento do suco de laranja deve ser maior do que para o suco de uva, de forma a manter o tempo de trânsito em conformidade com a frequência dos pulsos da fonte de alta tensão. Para um mesmo tipo de suco, o tempo de trânsito e frequência calculados são iguais, independente do raio do eletrodo considerado, em razão da mesma velocidade média, ajustada a partir da velocidade de entrada em função do raio, conforme foi apresentado na Tabela 5.6.

Ressalta-se que o tempo de trânsito também define a produtividade de um equipamento PEF para um determinado tipo de líquido. Levando em consideração os tempos de trânsito obtidos para os sucos e, considerando o raio do eletrodo interno da geometria coaxial de 1cm, ou seja, um volume de tratamento de 24ml, a capacidade de tratamento seria de 163L/hora e 221.5L/hora para os sucos de uva e laranja, respectivamente.

Apesar da redução do tempo de trânsito do líquido na câmara de tratamento contribuir para um aumento de produtividade, isto pode resultar em um número de *Reynolds* acima do limite estabelecido para um escoamento laminar, já que a velocidade aumenta neste caso. Além disso, à medida que o sistema aumenta sua capacidade, em razão de uma redução do tempo de trânsito, é necessário verificar se a especificação de frequência da fonte de alta tensão está de acordo com a frequência dos pulsos requerida, considerando que a frequência da fonte de alta tensão deve ser incrementada à medida que o líquido escoar mais rapidamente através da câmara de tratamento.

5.3.3 Análise Térmica

A temperatura no líquido durante tratamento PEF é um dos fatores críticos que afeta as propriedades sensoriais e nutricionais do produto durante o tratamento. No tratamento por pasteurização, por exemplo, pode ocorrer alterações de aroma, cor e sabor.

Suco de uva		
$t_t(s)$	$T_p(s)$	$freq(Hz)$
0.53	0.017	57.7
Suco de laranja		
$t_t(s)$	$T_p(s)$	$freq(Hz)$
0.39	0.013	76.9

Tabela 5.7 – Resultados do tempo de trânsito, período e frequência do pulso para cada tipo de suco

Alterações de cor, por exemplo, ocorrem devido à ação enzimática por polifenoloxidase durante o processamento. Nos sucos de frutas, pode ocorrer também perda de vitamina C e caroteno. Desta forma, a análise da distribuição da temperatura dentro da câmara de tratamento de um sistema PEF é essencial para projeto de um sistema eficiente e seguro do ponto de vista nutricional (BUCKOW et al., 2010).

A distribuição de temperatura na câmara de tratamento para o suco de uva com valor inicial de temperatura de 20°C é mostrada na Figura 5.13, considerando a combinação de variáveis que gera um maior valor de temperatura ($V = 24kV$, $t = 300us$ e $r_i = 1cm$). O aumento da temperatura no líquido em tratamento ocorre devido à dissipação por efeito Joule, a qual é proporcional ao quadrado da magnitude do campo elétrico (fonte de calor). Conforme mostrado, existem pontos de maior aquecimento próximo às bordas do eletrodo interno com temperatura excedendo 60°C , sendo consequência da alta intensidade do campo elétrico nestas regiões. Estes pontos de aquecimento podem resultar em inativação microbiana não homogênea e em degradação dos componentes líquidos durante o tratamento. Em aplicações industriais, um escoamento turbulento pode reduzir a ocorrência de *hot spots* no líquido, em virtude da recirculação do fluido em áreas de maior temperatura, contribuindo com a uniformidade térmica dentro da área de tratamento.

A Figura 5.14 mostra a distribuição de temperatura radial em diferentes posições ao longo do eixo vertical z utilizando a combinação de variáveis anterior ($V = 24kV$, $t = 300us$ e $r_i : 1cm$). No eletrodo interno, ou seja, para distância do eixo de simetria $y < 1cm$, as curvas de temperatura são similares devido à alta condutividade térmica do aço inoxidável, o que resulta numa condução de calor mais rápida e temperatura mais uniforme nesta região. No líquido $1 < y < 2.2cm$, os perfis de temperatura são diferentes, alcançando um valor máximo para uma altura de $2.5cm$ na região onde o campo elétrico tem maior intensidade, e decrescendo em direção ao eletrodo externo. Os valores de pico maiores à medida que o valor de z aumenta é justificado pelo aumento do campo elétrico e, consequentemente, elevação da temperatura à medida que há uma maior aproximação da borda superior do eletrodo interno.

A temperatura média final do fluido em tratamento, após a aplicação do trem de

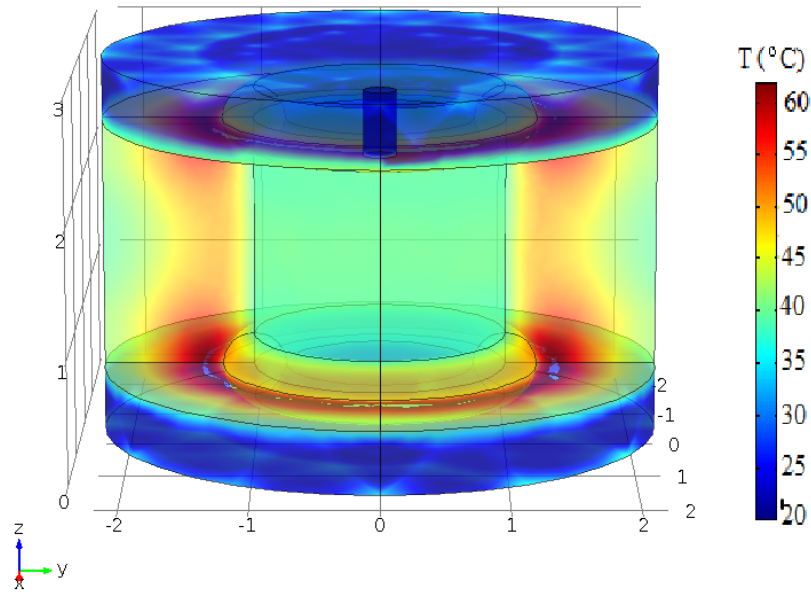


Figura 5.13 – Distribuição 3D da temperatura dentro da câmara de tratamento para suco de uva ($V = 24kV$, $t = 300us$ and $r_i = 1cm$)

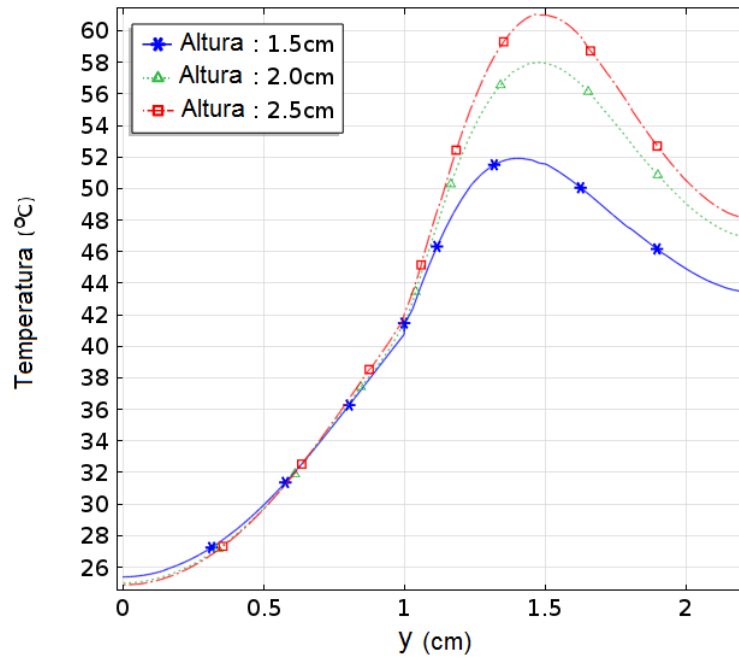


Figura 5.14 – Distribuição radial de temperatura para diferentes valores da altura z ($V = 24kV$, $t = 300us$ and $r_i = 1cm$)

pulsos, é influenciada pela condutividade do meio líquido. Outro parâmetro que afeta a temperatura final, porém de forma menos impactante, é a frequência de aplicação dos pulsos, considerando que o tempo de resfriamento entre pulsos é menor à medida que a frequência aumenta. A Figura 5.15 mostra a variação temporal da temperatura do suco de uva para as frequências de $57.7Hz$ (frequência calculada para o suco de uva para um escoamento laminar) e para frequência de $100Hz$ (frequência dos pulsos utilizada em

estudos anteriores para fluido estático), considerando a aplicação de potencial de $24kV$ nos eletrodos e $r_i = 1cm$. A diferença de temperatura final para as duas frequências é de apenas $0.2^\circ C$, o que mostra o impacto pouco significativo da frequência na temperatura final do líquido em tratamento.

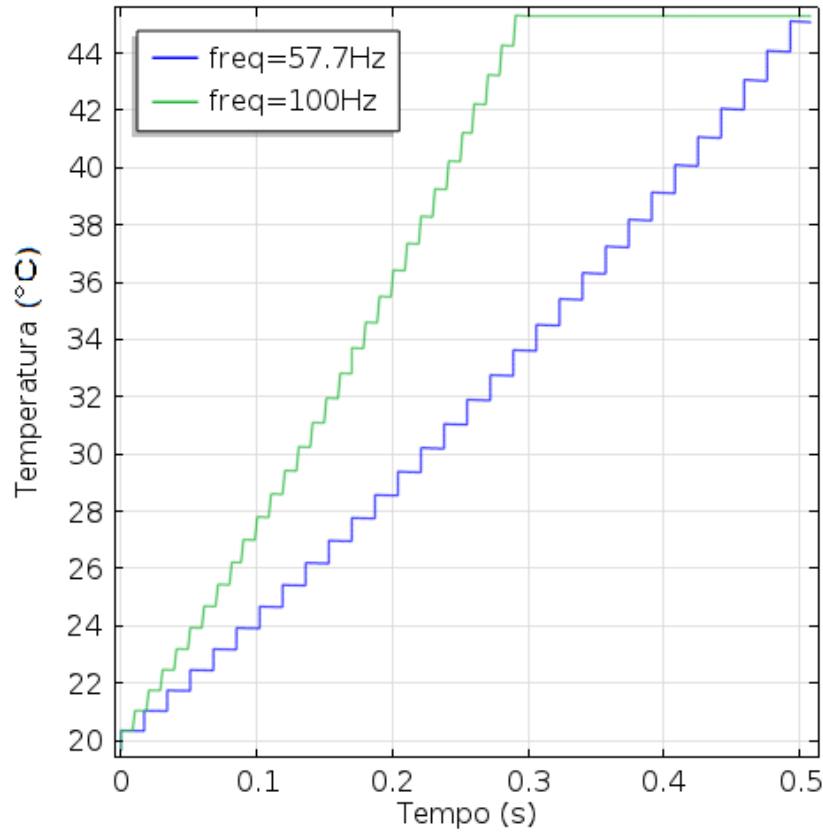


Figura 5.15 – Temperatura do suco de uva durante a aplicação do trem de pulsos para frequências de 57.7Hz e 100Hz ($V = 24kV$, $t = 300us$ e $r_i = 1cm$)

A Figura 5.16 apresenta uma comparação do aumento gradativo da temperatura em função do tempo de aplicação dos pulsos para os sucos de uva e laranja, para $V = 24kV$ e $r_i = 1cm$. Nesta Figura, cada degrau de temperatura corresponde à aplicação de um pulso de $10us$. Para cada tipo de suco, foi parametrizada a frequência de pulsos sincronizada com o escoamento laminar, conforme dados da Tabela 5.7. Observa-se que a temperatura para o suco de laranja cresce mais rapidamente em relação ao suco de uva, já que o suco de laranja possui maior condutividade (Tabela 4.4). Para atender o limite superior de temperatura média de $45^\circ C$ especificada para o estudo, o número máximo de pulsos para o suco de laranja, para a condição de $V = 24kV$ e $r_i = 1cm$, seria de $n = 5$ pulsos, o que corresponde a um tempo de tratamento de $50us$, e para o suco de uva seria de $n = 30$ pulsos, correspondendo a um tempo de tratamento de $300us$.

Em estudos computacionais contemplando a análise térmica, tais como em (SALDAÑA et al., 2010) e (KNOERZER; BAUMANN; BUCKOW, 2012), a análise de temperatura no fluido não foi realizada no sentido de limitar o número de pulsos a partir de

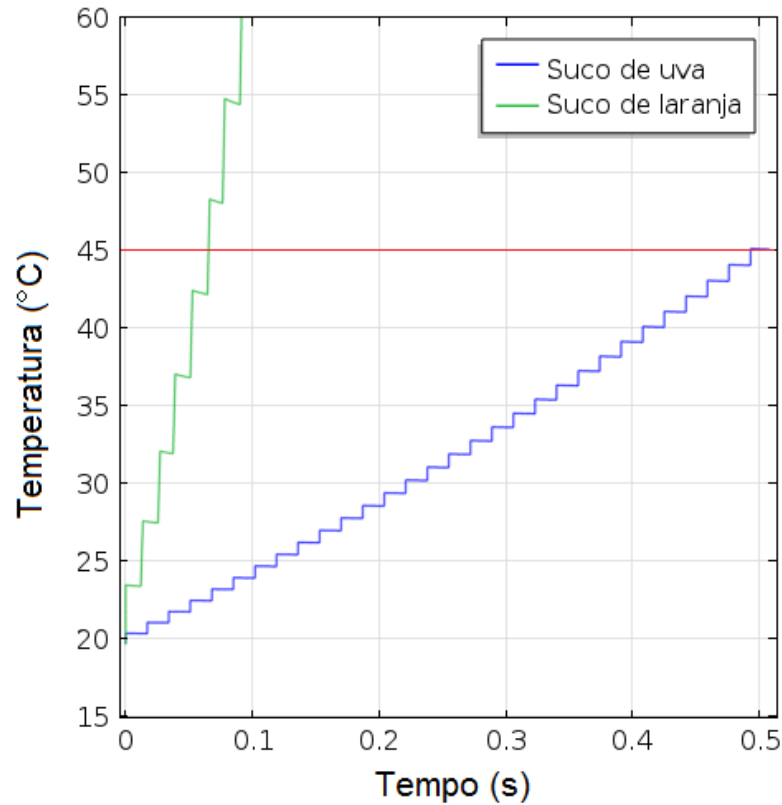


Figura 5.16 – Temperatura média do líquido durante aplicação do trem de pulsos para sucos de uva e laranja

um determinado limite de temperatura pré-estabelecido. Ressalta-se a importância desta análise para definição do protocolo de operação de um sistema PEF para cada tipo de produto líquido, considerando que o número de pulsos e, consequentemente, o tempo de tratamento deve estar em conformidade com o limite térmico do sistema.

5.3.4 Resultados Pós-processamento

5.3.4.1 Resultados da Matriz DOE

A Tabela 5.8 apresenta os resultados de campo elétrico médio ponderado E_p obtidos para cada combinação de valores de tensão aplicada V e raio do eletrodo interno r_i , além do valor de campo elétrico máximo para cada condição da matriz experimental. O campo elétrico ponderado foi obtido através da Equação 4.14, considerando os resultados de campo elétrico em cada elemento da malha ponderando com o volume do elemento. O campo elétrico obtido através do cálculo pós processamento variou entre 8.69 e 20.27 kV/cm. O campo elétrico médio aumenta à medida que a tensão aplicada e raio do eletrodo aumentam, o que é desejável do ponto de vista de inativação, porém impacta na eficiência energética do sistema.

Neste modelo, o campo elétrico na região de tratamento é independente da condutividade do líquido, já que a impedância da fonte de alta tensão não é considerada. O

campo elétrico máximo na câmara de tratamento coaxial ($48.2kV/cm$) foi obtido para a condição de $V = 24kV$ e $r_i = 1cm$.

$r_i(cm)$	$V(kV)$	$\overline{E_p}(kV/cm)$	$E_{max}(kV/cm)$
0.5	16	8.69	28.2
0.625	16	9.68	28.3
0.75	16	10.79	29.9
0.875	16	12.05	30.2
1.0	16	13.51	32.4
0.5	18	9.78	31.8
0.625	18	10.90	31.9
0.75	18	12.14	33.6
0.875	18	13.56	34.0
1.0	18	15.20	36.4
0.5	20	10.87	35.3
0.625	20	12.11	35.3
0.75	20	13.49	37.3
0.875	20	15.07	37.7
1.0	20	16.89	40.3
0.5	22	11.95	38.7
0.625	22	13.32	38.8
0.75	22	14.84	40.5
0.875	22	16.58	41.4
1.0	22	18.58	44.3
0.5	24	13.04	42.2
0.625	24	14.53	42.3
0.75	24	16.19	44.6
0.875	24	18.08	45.0
1.0	24	20.27	48.2

Tabela 5.8 – Matriz de planejamento experimental e resultados de campo elétrico

5.3.4.2 Ajustes por Regressão Não Linear

Os resultados do campo elétrico médio da matriz de planejamento experimental foram ajustados por regressão não linear através da Equação (4.17) utilizando o software Labfit^{MR}, de forma a obter uma equação de campo elétrico médio na câmara para a câmara de tratamento coaxial em função das variáveis da matriz experimental. Neste ajuste, foi obtido um valor de $k_1=0.710$. Através do teste de análise de variância ANOVA, adotando nível de significância de 0.05, foi confirmado o efeito dos fatores r ($p < 2 \times 10^{-16}$), V ($p < 2 \times 10^{-16}$) e interação entre os mesmos ($p = 3.91 \times 10^{-8}$) nos valores de campo elétrico obtidos.

Para este estudo, foi adotado um valor mínimo de R^2 igual a 0.9, indicando que o modelo de regressão deve explicar, no mínimo, 90% dos valores obtidos. No modelo de regressão, foi obtido um valor de coeficiente de determinação $R^2=0.97$, atendendo o limite pré-estabelecido.

De posse do valor de k_1 , a Equação 4.17, a qual expressa o campo elétrico médio

obtido através de regressão não linear, pode ser expressa por:

$$E_r = 0.710 \left(\frac{V}{\ln\left(\frac{2.2}{r_i}\right)} \right), \quad (5.4)$$

Com objetivo de verificar a consistência do modelo de regressão, os dados foram analisados em relação à normalidade dos resíduos gerados pela regressão e homogeneidade da variância de $\overline{E_p}$ (homocedasticidade), através do pacote de estatística *R* (software *free*). A independência dos dados é garantida para as simulações computacionais, considerando que os eventos são completamente independentes entre si.

A premissa de normalidade foi validada aplicando o método de *Shapiro-Wilk* nos resíduos gerados. Com base no valor de $p = 0.21$ obtido, podemos afirmar que, a um nível de significância de 0.05, que os resíduos provêm de uma população normal. Através da Figura 5.17, é possível avaliar qualitativamente a distribuição normal dos resíduos, sendo que os *outliers* observados no gráfico não afetam significativamente a distribuição normal.

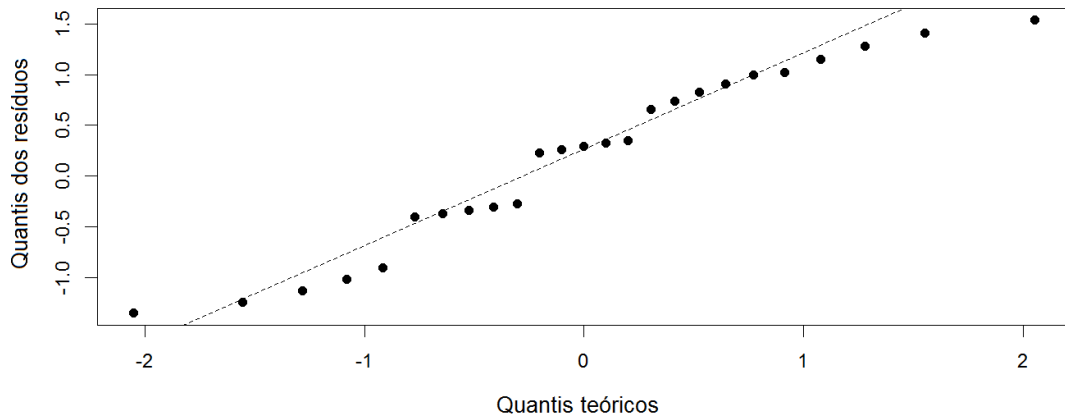


Figura 5.17 – Gráfico Quantil-Quantil (QQ) dos resíduos gerados pelo modelo de regressão de $E_p(kV/cm)$

Para avaliar a homogeneidade da variância entre grupos de fatores, foi aplicado o teste de *Fligner-Killeen*. Os resultados de $p = 0.48$ e $p = 0.69$, para os fatores r_i e V , respectivamente, indicam que há uma homogeneidade da variância em relação aos resultados de $\overline{E_p}$ obtidos, considerando que são maiores que o nível de significância de 0.05 estabelecido para o estudo.

A expressão do campo elétrico médio obtida pelo ajuste de regressão (Equação 5.4), foi inserida nas funções objetivo de inativação microbiana do modelo de *Weibull* (Equação 5.5) e densidade de energia (Equação 5.6). Desta forma, estas duas funções foram expressas em termos do campo elétrico E_r , o qual depende da tensão aplicada e do raio

do eletrodo interno, além do tempo de tratamento t .

$$f_1 = \log_{10} S(t, E_r) = - \left[\frac{t}{10(A_0 + A_1 E_r + A_2 E_r^2 + A_3 E_r^3)} \right]^{\beta_{av}} \quad (5.5)$$

$$f_2 = Q_s(t, E_r) = \frac{\sigma(T) \sum_{i=1}^{nel} E_r^2 v_i t}{m} \quad (5.6)$$

5.4 Estudos de Caso

Após ajustes por regressão não linear dos dados de campo elétrico médio obtidos pelas simulações no COMSOL^{MR} e incorporação da expressão resultante nas funções objetivo de inativação microbiana e densidade de energia, foram analisados quatro estudos de caso visando a aplicação da metodologia computacional em diferentes tipos de análises. Conforme abordado no Capítulo 4, um algoritmo NSGA-II adaptado de (SESHADRI, 2006) foi utilizado nos estudos de caso para encontrar a fronteira Pareto estimada, a qual contém o conjunto ótimo de soluções para cada caso.

A formulação matemática geral para o problema de otimização multiobjetivo, na qual se busca minimizar as funções f_1 e f_2 , pode ser expressa pela Equação 5.7. O limite superior da tensão aplicada (V) e a faixa do raio do eletro interno r_i foram definidos de forma a atender o limite máximo de campo elétrico de $50kV/cm$. O limite mínimo da tensão aplicada foi especificado em dois terços da tensão máxima.

Quanto à restrição do tempo de tratamento ($t_i \leq t \leq t_s$), a mesma depende do tipo de líquido analisado. Conforme discutido na Seção 5.3.3, o limite superior t_s está relacionado com o limite térmico do líquido,

$$\begin{aligned} & \min(f_1, f_2) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 16 \leq V \leq 24kV \\ t_i \leq t \leq t_s \\ 0.5 \leq r_i \leq 1cm \end{cases} \end{aligned} \quad (5.7)$$

Os estudos de caso são discutidos a seguir.

5.4.1 Estudo de Caso 1: Comparativo entre Diferentes Microrganismos em Sucos de Uva

A presença dos microrganismos *E. coli* e *S. aureus* em sucos de frutas é uma preocupação primária das autoridades de saúde, tendo em vista a associação destes agentes

patogênicos com problemas de surtos alimentares (RAYBAUDI-MASSILIA et al., 2009). Neste estudo de caso, foram comparados os resultados obtidos pelo modelo computacional para estes dois microrganismos em sucos de uva. A resistência de cada microrganismo ao tratamento é expressa através dos parâmetros do modelo de *Weibull* (Equação 2.7) reportados em (HUANG et al., 2014), conforme apresentado na Tabela 5.9. Os parâmetros de cada microrganismo foram inseridos na Equação 5.5 para cálculo da taxa de inativação microbiana (f_1).

<i>E. coli</i>				
A_0	A_1	A_2	A_3	β_{av}
3.31	-3.68×10^{-2}	-1.08×10^{-3}	-9.45×10^{-7}	0.6610
<i>S. aureus</i>				
A_0	A_1	A_2	A_3	β_{av}
1.77	0.166	-1.23×10^{-2}	2.01×10^{-4}	0.5059

Tabela 5.9 – Parâmetros do modelo de *Weibull* para *E. coli* e *S. aureus*

O limite superior do tempo de tratamento (t_s) foi parametrizado em 300us (30 pulsos), para uma duração do pulso de 10us, atendendo o limite térmico do sistema. Para especificação do limite inferior (t_i), foi realizada uma análise prévia com base em curvas Pareto estimadas obtidas para diferentes valores de t_i . Conforme Figura 5.18, as curvas Pareto para suco de uva contendo bactéria *E. coli* para diferentes valores de t_i mostram que o limite inferior do tempo de tratamento impacta no ponto de saturação das variáveis tensão aplicada e raio do eletrodo interno (saturação do campo elétrico), os quais são destacados nas curvas. À medida que o limite inferior aumenta, o ponto de saturação ocorre em níveis mais altos de inativação e densidade de energia. É possível observar que, para $t_i = 10us$ (1 pulso), o ponto de saturação determina uma faixa muito restritiva para soluções com diferentes valores de tensão aplicada e raio do eletrodo interno e, conseqüentemente, uma faixa predominante com soluções nas quais somente o tempo de tratamento apresenta variações (após o ponto de saturação). Para $t_i = 200us$, a faixa na qual o tempo de tratamento é predominante é reduzida em relação aos demais casos. Nos estudos com suco de uva, optou-se por $t_i = 100us$, correspondendo a um ponto de saturação próximo da metade da faixa da inativação microbiana da curva Pareto estimada (-1.1).

Considerando a Equação 5.4 referente ao campo elétrico em função das variáveis tensão aplicada e raio do eletrodo interno, inserida nas funções f_1 (inativação microbiana) e f_2 (densidade de energia,) os parâmetros do modelo de *Weibull* para cada microrganismo e as restrições das variáveis do problema, a formulação do problema de otimização

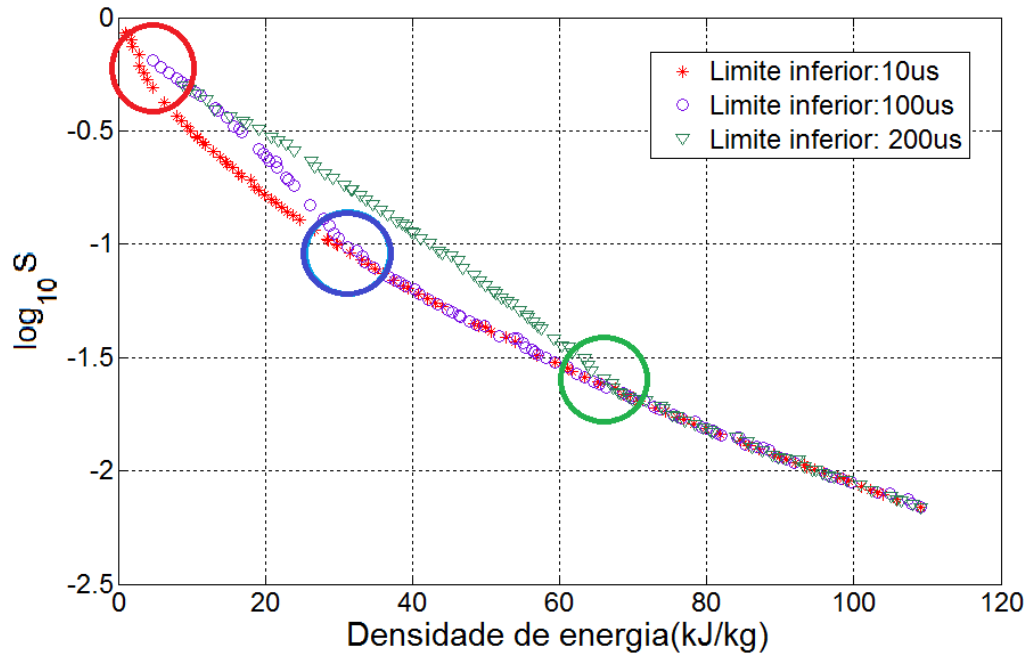


Figura 5.18 – Curvas Pareto para suco de uva contendo bactéria *E. coli* para diferentes limites inferiores do tempo de tratamento

multiobjetivo para o estudo de caso pode ser expressa por:

$$\begin{aligned} & \min(f_1, f_2) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 16 \leq V \leq 24kV \\ 100 \leq t \leq 300us \text{ (suco de uva)} \\ 0.5 \leq r_i \leq 1cm \end{cases} \end{aligned} \quad (5.8)$$

A comparação entre as curvas Pareto estimadas para *E. coli* e *S. aureus* é apresentada na Figura 5.19. A maior inativação microbiana para *S. aureus* em comparação com *E. coli* reflete a maior resistência da bactéria *E. coli* ao tratamento. Conforme discutido na Seção 2.5.3, apesar de ter uma dimensão maior do que a bactéria *S. aureus* e ser do tipo gram-negativa, alguns estudos mostram que a bactéria *E. coli* possui maior resistência ao tratamento do que a bactéria *S. aureus* em meios ácidos. As regiões destacadas nas curvas são referentes às zonas em que a tensão aplicada e o raio interno do eletrodo, os quais afetam a distribuição de campo elétrico, alcançam o limite máximo e, conseqüentemente, o valor máximo de campo elétrico é obtido. A partir da saturação destas variáveis, o tempo de tratamento é predominante e maiores inativações microbianas são obtidas a partir do aumento deste parâmetro.

Para complementar a análise e ter uma visão das soluções ótimas aproximadas em função do campo elétrico e do tempo de tratamento, foram plotados os gráficos da

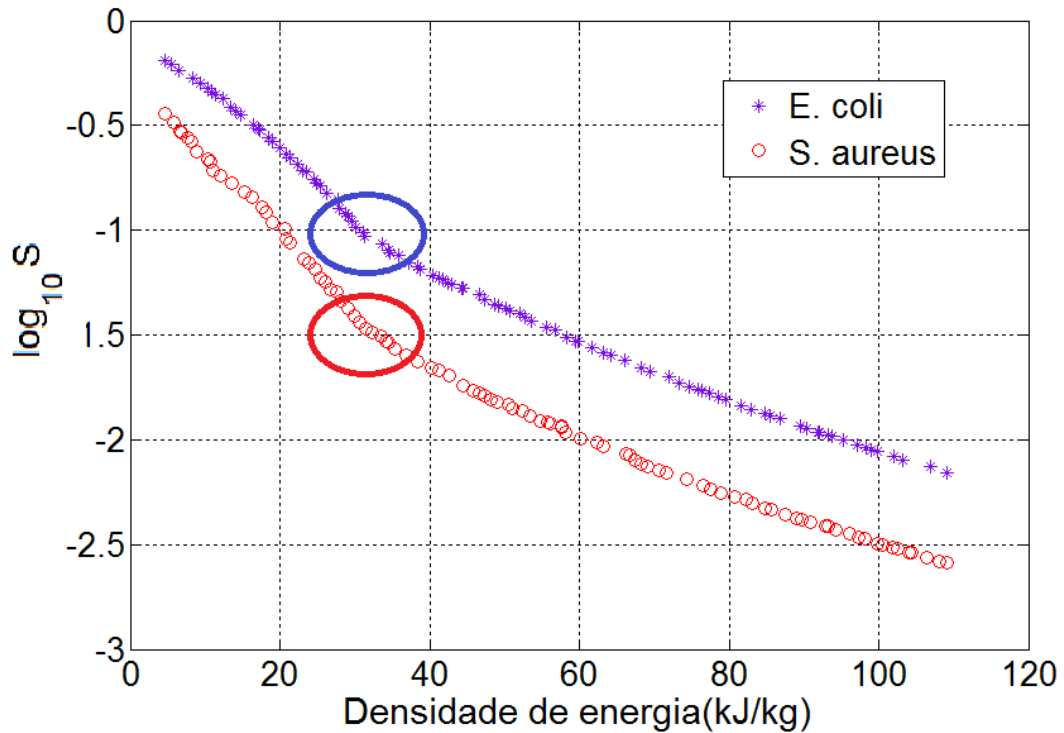


Figura 5.19 – Comparativo entre curvas Pareto para *S. aureus* e *E. coli*

inativação microbiana para as duas bactérias, em função do campo elétrico, calculado através da Equação 5.4 a partir de variáveis de projeto obtidas para a curva Pareto estimada (raio do eletrodo interno e tensão aplicada), e do tempo de tratamento também obtido através do conjunto de soluções, conforme Figuras 5.20 e 5.21, respectivamente. O campo elétrico atinge a saturação no valor de 21.6 kV/cm , para uma inativação microbiana de aproximadamente -1.1 para a bactéria *E. coli* e -1.5 para a bactéria *S. aureus*. A partir da saturação do campo elétrico, o tempo de tratamento se torna preponderante, conforme mostrado na Figura 5.21.

Em relação à análise da densidade de energia em função ao campo elétrico obtido a partir do conjunto de soluções ótimas aproximadas, conforme mostrado na Figura 5.22 tendo como exemplo a bactéria *E. coli*, o comportamento é dual em relação à inativação microbiana, sendo que o ponto de saturação do campo elétrico ocorre em aproximadamente 30 kJ/kg .

Nas curvas Pareto estimadas, qualquer ponto pode ser uma solução ótima aproximada, dependendo dos requisitos de projeto e/ou processo de tratamento do suco em questão. A Tabela 5.10 mostra alguns pontos selecionados das curvas Pareto estimadas. As soluções 1 e 2 priorizam baixos valores de densidade de energia e possuem um mesmo valor de raio de eletrodo interno igual a 0.56 cm . Neste caso, a taxa de inativação microbiana para *S. aureus* foi 0.33 maior do que para *E. coli*. Por outro lado, as soluções 3 e 4 priorizam

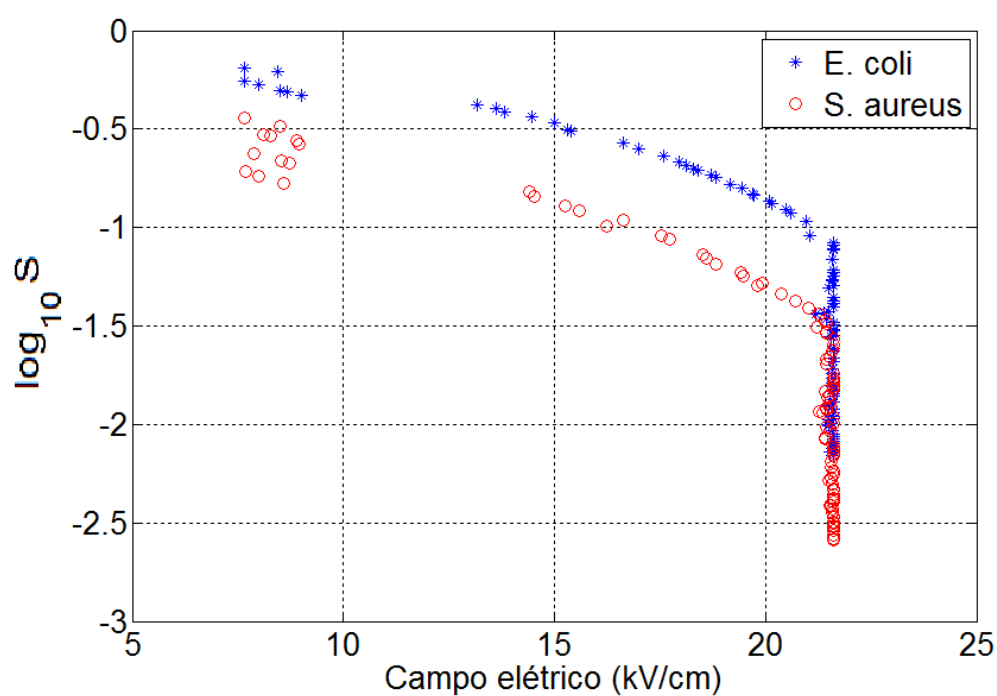


Figura 5.20 – Inativação microbiana em função dos valores do campo elétrico obtido a partir do conjunto de soluções ótimas aproximadas para *S. aureus* e *E. coli*

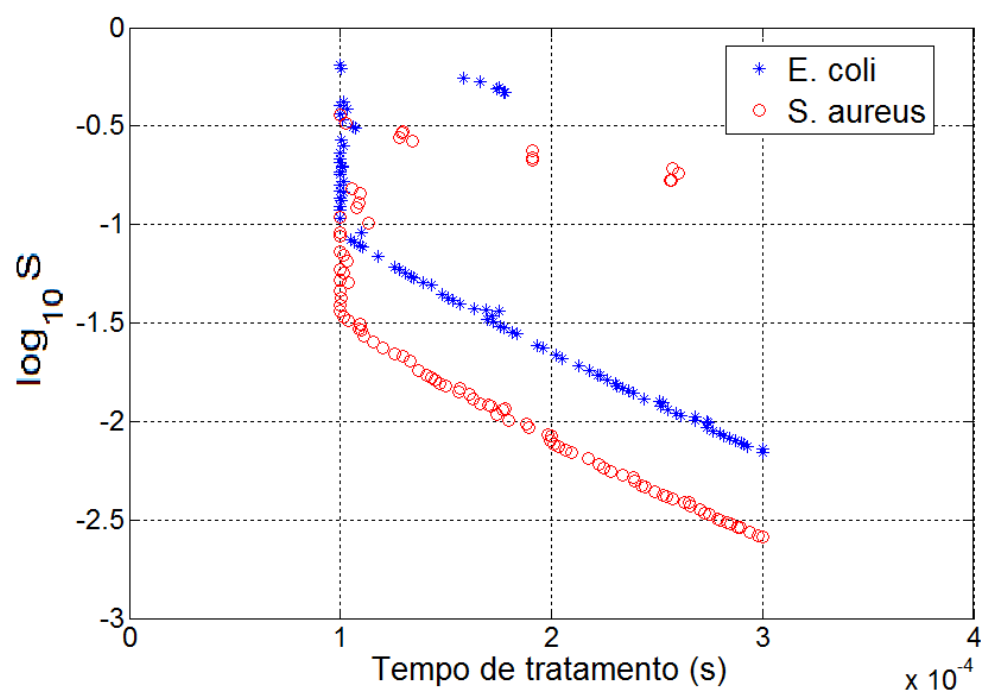


Figura 5.21 – Inativação microbiana em função dos valores do tempo de tratamento obtidos a partir do conjunto de soluções ótimas aproximadas para *S. aureus* e *E. coli*

taxas de inativações maiores, com valores de densidade de energia de 109.9 kJ/kg , sendo que a diferença entre as inativações para as duas bactérias foi de 0.43. Para estas soluções,

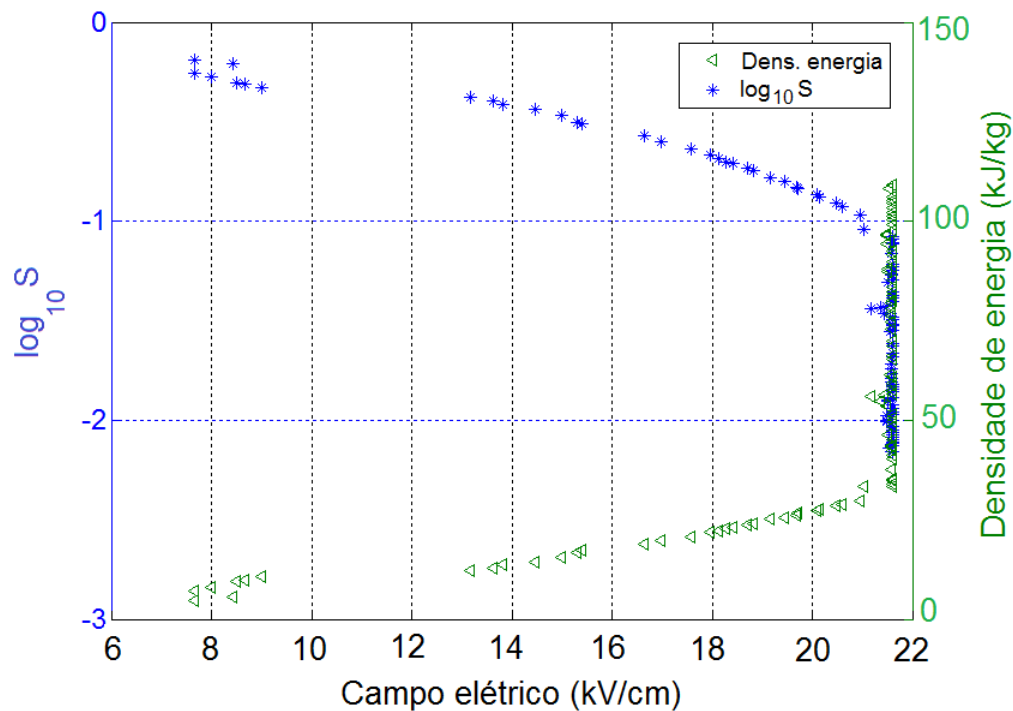


Figura 5.22 – Inativação microbiana e densidade de energia em função do campo elétrico obtido a partir do conjunto de soluções ótimas aproximadas para bactéria *E. coli*

todas as variáveis foram ajustadas para o limite superior. Outras soluções intermediárias podem ser selecionadas, ou seja, o projetista tem liberdade de escolha das soluções para seu sistema PEF em função das necessidades do projeto/processo.

Os coeficientes de variação (CV) foram obtidos para todos os casos para determinação da uniformidade da distribuição do campo elétrico, sendo menor para valor do raio de eletrodo mais alto ($r_i = 1.0$), o que contribui para um processamento mais uniforme do líquido dentro da câmara.

$Nr.sol.$	Microrganismo	$V(kV)$	$t(us)$	$r_i(cm)$	f_1	$f_2(kJ/kg)$	$CV(\%)$
1	<i>E. coli</i>	17.3	178	0.56	-0.33	10.7	0.35
2	<i>S. aureus</i>	16.5	191	0.56	-0.66	10.3	0.35
3	<i>E. coli</i>	24.0	300	1.0	-2.16	109.9	0.22
4	<i>S. aureus</i>	24.0	300	1.0	-2.59	109.9	0.22

Tabela 5.10 – Variáveis e funções objetivo de pontos selecionados das curvas Pareto estimadas

Caso o decisor/projetista defina previamente pelo maior valor de raio de eletrodo interno $r_i = 1cm$, priorizando uma maior uniformidade do campo elétrico dentro da câmara de tratamento, porém com um menor volume de líquido tratado, a otimização do sistema pode ser realizada em função das variáveis tensão aplicada e tempo de tratamento, fixando $r_i = 1cm$. Ressalta-se que a diferença de capacidades do sistema entre $r_i = 0.5cm$

e $r_i = 1\text{cm}$, considerando o fluido como suco de uva com tempo de trânsito $t_t = 0.53\text{s}$ apresentado na Tabela 5.7, é de aproximadamente 34L/hora , ou seja, cerca de 17.3% em relação à capacidade para $r_i = 0.5\text{cm}$ (197L/hora). Sendo assim, ao fixar o raio do eletrodo, pode ocorrer uma perda significativa da capacidade do sistema.

A Figura 5.23 apresenta uma comparação das curvas Pareto estimadas considerando a restrição $0.5 \leq r_i \leq 1.0\text{cm}$ e a nova condição com $r_i = 1\text{cm}$ para a bactéria *E. coli* em suco de uva. O conjunto de soluções ótimas aproximadas no espaço dos objetivos é bem similar, com exceção da região destacada em vermelho para baixos valores de inativação microbiana, indicando que, ao fixar previamente $r_i = 1\text{cm}$, densidades de energia abaixo de aproximadamente 18kJ/kg não fazem parte do conjunto de soluções Pareto estimadas.

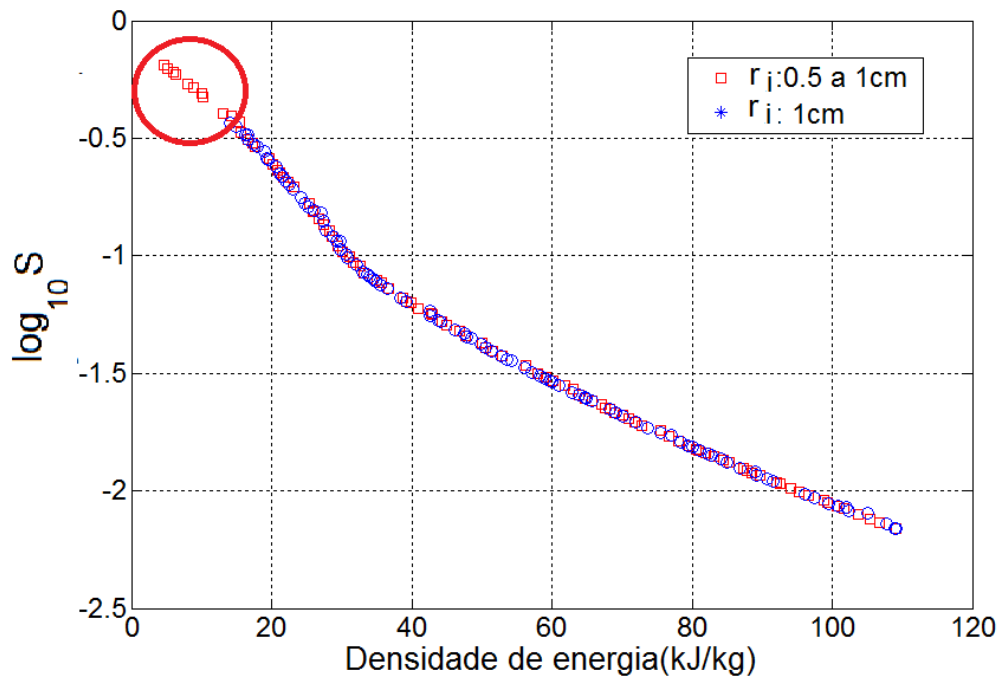


Figura 5.23 – Curvas Pareto para suco de uva contendo bactéria *E. coli* para $0.5 \leq r_i \leq 1.0$ e $r_i = 1\text{cm}$

A Figura 5.24 mostra a variação a densidade de energia em função do campo elétrico (Equação 5.4), sendo calculado a partir dos parâmetros do conjunto de soluções ótimas aproximadas. Para $r_i = 1\text{cm}$, o campo elétrico varia somente em função da variável tensão aplicada. Observa-se que, para a condição de raio do eletrodo variando entre $0.5 \leq r_i \leq 1.0\text{cm}$, magnitudes de campo elétrico de menor intensidade na região destacada, na qual há uma maior variação do raio do eletrodo, geram uma densidade de energia mais baixa nesta região. Isto justifica a região com valores mais baixos de densidade de energia para $0.5 \leq r_i \leq 1.0\text{cm}$ mostrada na Figura 5.23. Desta forma, ao fixar o raio do eletrodo para obter uma maior uniformidade do campo elétrico, é necessário avaliar os impactos na capacidade do sistema e nos valores de densidade de energia.

Os resultados obtidos através do modelo computacional para as duas bactérias

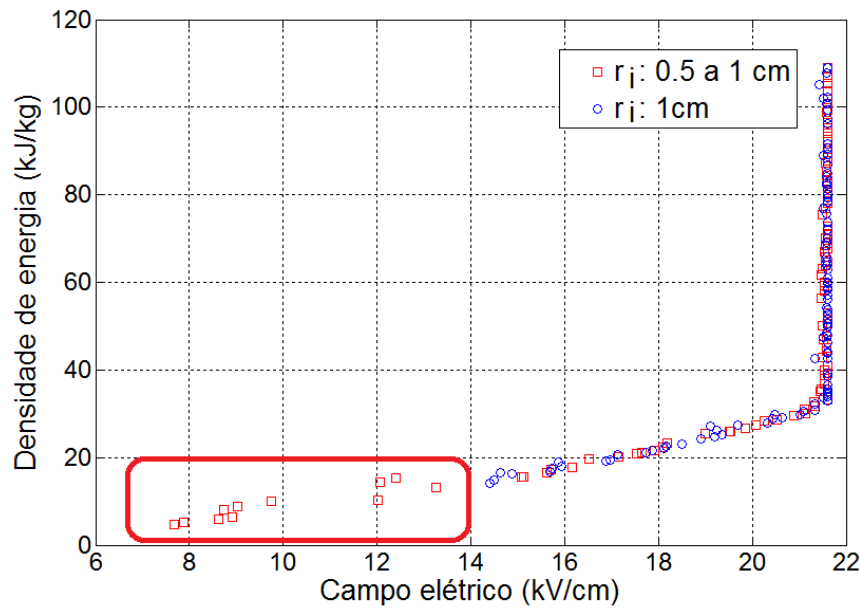


Figura 5.24 – Densidade de energia para *E. coli* em suco de uva em função dos valores de campo elétrico para $0.5 \leq r_i \leq 1.0\text{cm}$ e $r_i = 1\text{cm}$

em sucos de uva foram comparados com dados reportados na literatura. Em (HUANG et al., 2014), os parâmetros de inativação microbiana e densidade de energia foram experimentalmente correlacionados utilizando um sistema com uma câmara de tratamento co-linear. Nos experimentos, foram utilizados valores de campo elétrico entre 12 e 27kV/cm e tempo de tratamento de 34 a $275\mu\text{s}$. A condutividade do líquido foi de 0.09S/m a 20°C . Nos ensaios com campo elétrico de 21kV , a temperatura do líquido foi mantida dentro da faixa de 40 a 43°C durante o processamento, através de um sistema de resfriamento

Para esta análise, o campo elétrico do modelo computacional foi obtido calculado através da Equação 5.4, aplicando os valores obtidos para as variáveis de cada solução ótima aproximada (tensão aplicada e raio do eletrodo interno). Para as curvas Pareto estimadas das duas bactérias, foram filtradas as soluções com valores de campo elétrico próximos a 21kV (faixa de 20.5 a 21.5), para fins de comparação com as curvas apresentadas na literatura. As soluções selecionadas foram plotadas e comparadas com os dados extraídos da literatura, conforme Figuras 5.25 e 5.26 para as bactérias *E. coli* e *S. aureus*, respectivamente. Conforme mostrado nos gráficos, para ambos microrganismos, as curvas apresentam uma melhor aproximação para valores menores de inativação. Como todos os dados foram obtidos para valores de campo elétrico próximos à saturação, as variações de inativação microbiana dependem predominantemente do tempo de tratamento e a densidade de energia varia principalmente em função do tempo de tratamento e da condutividade. As diferentes faixas de tempo de tratamento, ou seja, 100 a $300\mu\text{s}$ no modelo computacional e 34 a $275\mu\text{s}$, além das diferentes condutividades em função da temperatura, podem justificar as diferenças entre os valores obtidos. Observa-se que, para

um mesmo valor de inativação microbiana, a densidade de energia é menor para o modelo computacional, o que pode ter relação com a variação da condutividade com a temperatura. Apesar dos valores de condutividades serem próximas na temperatura de 20 °C, ou seja, 0.08 S/m para o suco de uva do modelo computacional e 0.09 S/m para o suco de uva utilizado nos estudos em (HUANG et al., 2014), o consumo energético e, consequentemente, a densidade de energia tem uma tendência maior de crescimento nos resultados reportados na literatura, já que o líquido é submetido a temperaturas mais elevadas (40 a 43 °C) durante a maior parte do processamento.

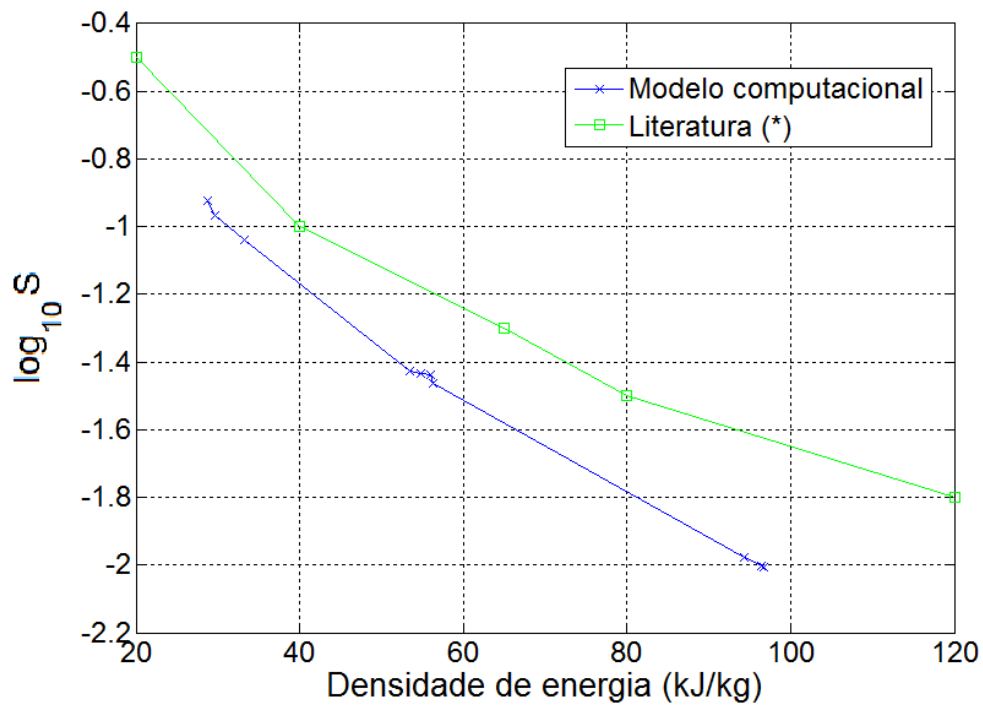


Figura 5.25 – Comparativo de resultados de inativação microbiana e densidade de energia entre modelo computacional e da literatura (HUANG et al., 2014) para a bactéria *E. coli*

Após a geração das curvas Pareto estimadas, o conjunto de variáveis obtido para cada ponto ótimo das curvas Pareto dos microrganismos *S. aureus* e *E. coli* foram parame- trizados no COMSOL^{MR} e novas simulações foram realizadas para fins de comparação entre os resultados gerados pelo algoritmo de otimização multiobjetivo e pelo COMSOL^{MR}. Observa-se na Figura 5.27 uma aproximação aceitável entre as curvas para ambos mi- crorganismos, principalmente nas regiões nas quais não há saturação das variáveis tensão aplicada e raio do eletrodo interno. A concordância entre os resultados do COMSOL^{MR} e das curvas Pareto indica uma análise consistente pelo modelo computacional.

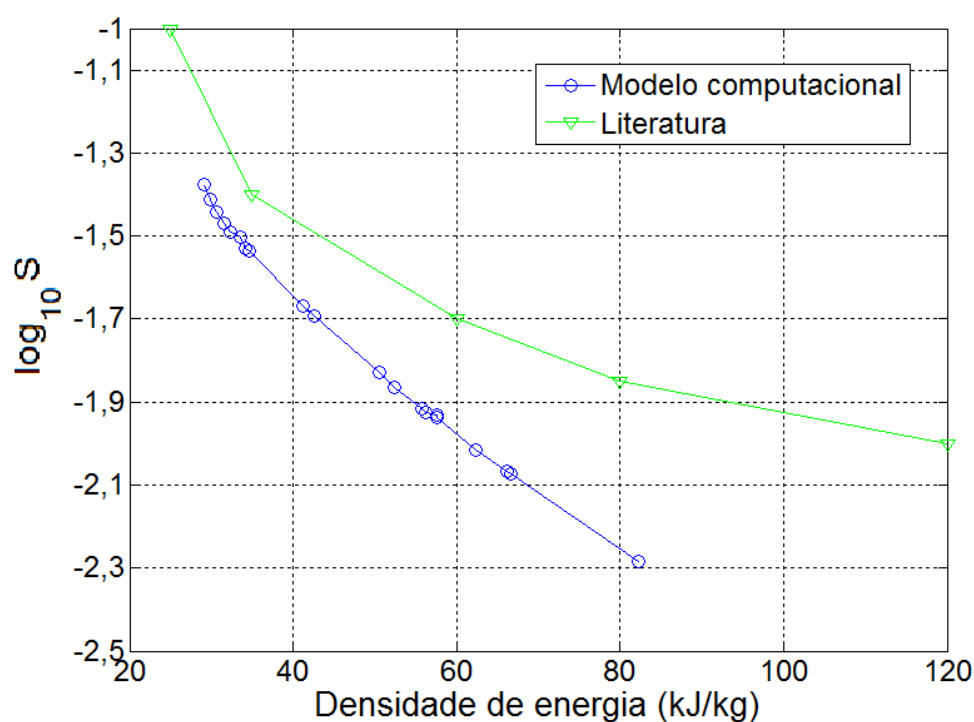


Figura 5.26 – Comparativo de resultados de inativação microbiana e densidade de energia entre modelo computacional e da literatura (HUANG et al., 2014) para a bactéria *S. aureus*

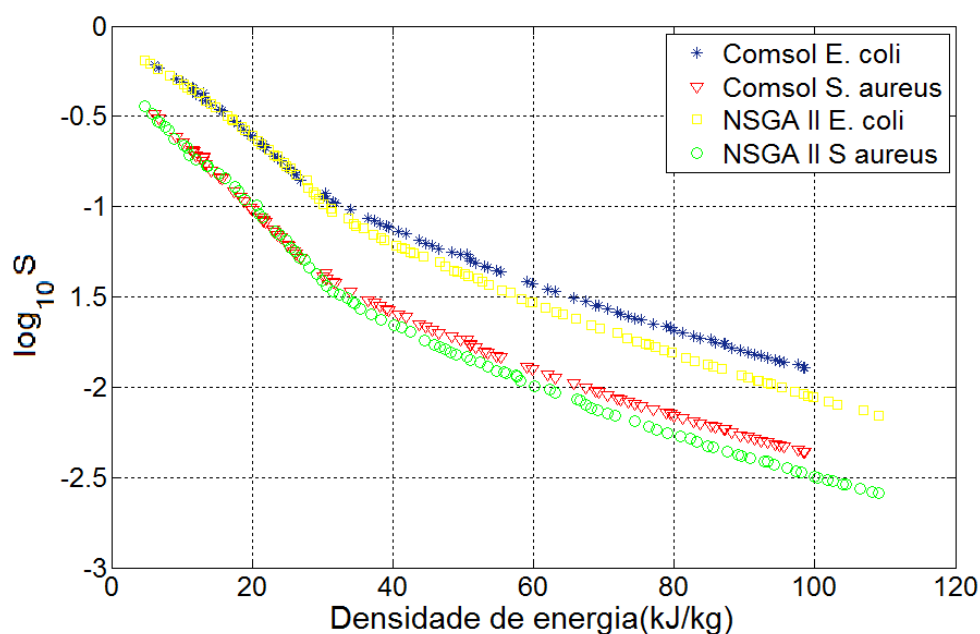


Figura 5.27 – Comparação entre curvas Pareto estimadas e resultados do COMSOL ^{MR} para *S. aureus* e *E. coli*

5.4.2 Estudo de caso 2: Comparação entre Diferentes Tipos de Líquidos

As simulações para diferentes tipos de sucos (uva e laranja) tem como objetivo comparar a eficiência do sistema para tratamento de líquidos com diferentes propriedades físico-químicas. O estudo de caso é aplicado para a bactéria *E. coli*. Na Seção 5.3.2, as frequências de aplicação dos pulsos de alta tensão para os sucos de uva e laranja foram obtidas em função do tempo de trânsito de cada suco na câmara de tratamento, de forma a sincronizar a aplicação dos pulsos com o tempo de trânsito para um escoamento laminar. As frequências de $57.7Hz$ e $76.9Hz$ foram consideradas para os sucos de uva e laranja neste estudo de caso, respectivamente.

Conforme apresentado na Seção 5.3.3 (Figura 5.16), para o limite de temperatura de $45^{\circ}C$ especificado neste estudo, o tempo de tratamento para o suco de laranja é de $50\mu s$, enquanto o tempo de tratamento para o suco de uva é de $300\mu s$, em função da diferença entre as condutividades elétricas dos sucos. A Figura 5.28 mostra a variação de condutividade dos sucos de uva e laranja em função da temperatura ($20^{\circ}C$ a $45^{\circ}C$), baseado nas equações apresentadas na Tabela 4.4. A razão entre as condutividades do suco de laranja em relação ao suco de uva varia de 3.7 a 4.8 na faixa de temperatura considerada. A maior condutividade do suco de laranja não favorece a inativação microbiana do mesmo, já que limita o número de pulsos e, conseqüentemente, o tempo de tratamento.

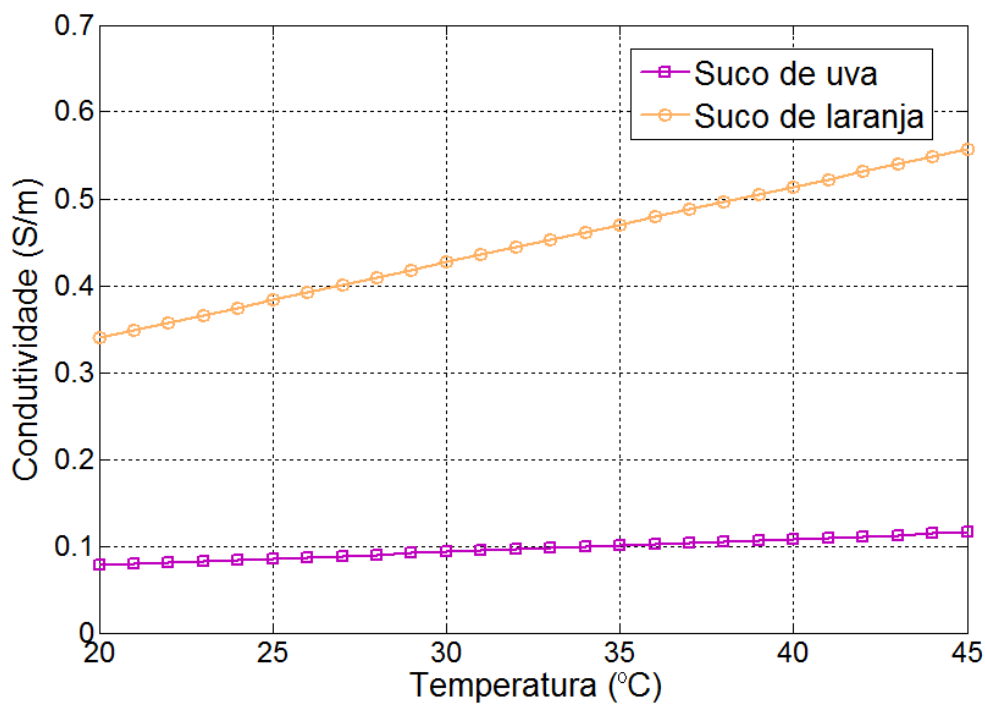


Figura 5.28 – Condutividade dos sucos de uva e laranja em função da temperatura

Os parâmetros do modelo de *Weibull* da bactéria *E. coli* para os sucos de uva e laranja foram extraídos de estudos experimentais reportados em (HUANG et al., 2014)

e (RIVAS et al., 2006), respectivamente. Nos estudos em (RIVAS et al., 2006) para a bactéria *E. coli* em sucos de laranja, os dados reportados se referem à Equação 2.10 (forma exponencial do modelo de *Weibull*), ou seja, utilizam os parâmetros do modelo de *Weibull* β' e δ' . Os dados de δ' deste estudo foram ajustados com base na Equação 2.8, gerando os coeficientes A_0 a A_2 por regressão polinomial. Considerando a baixa influência do campo elétrico em β' , a média dos dados reportados foi feita, resultando em β'_{av} . Os dados da bactéria *E. coli* em sucos de uva são os mesmos utilizados no estudo de caso 1, os quais foram ajustados a partir da Equação 2.7 (modelo de *Weibull*). A Tabela 5.11 resume os parâmetros do modelo de predição de *Weibull* utilizados neste estudo de caso, sendo β_{av} (suco de uva)/ β'_{av} (suco de laranja) o coeficiente de forma e A_0 a A_3 os coeficientes da regressão polinomial do modelo obtidos mediante ajuste dos dados experimentais à Equação de δ (suco de uva)/ δ' (suco de laranja).

<i>E. coli</i> (suco de uva)				
A_0	A_1	A_2	A_3	β_{av}
3.31	-3.68×10^{-2}	-1.08×10^{-3}	-9.45×10^{-7}	0.661
<i>E. coli</i> (suco de laranja)				
A_0	A_1	A_2	A_3	β'_{av}
1.64	$-1,50 \times 10^{-1}$	2.40×10^{-2}	—	0.274

Tabela 5.11 – Parâmetros do modelo de *Weibull* para *E. coli* em sucos de uva e laranja

Para comparação da resistência da bactéria *E. coli* nos sucos de uva e laranja, foi plotado gráfico da inativação microbiana, considerando a faixa de tempo de tratamento para cada tipo de suco, ou seja: 100 a 300us para o suco de uva e 10 a 50us para o suco de laranja, para um valor de campo elétrico médio no líquido igual a 21kV/cm. Conforme mostrado na Figura 5.29, observa-se que, em geral, a inativação microbiana da bactéria *E. coli* para o suco de laranja é maior do que para o suco de uva, em função da sua menor resistência ao tratamento para este tipo de suco, o que pode ser explicado pelo maior grau de acidez do mesmo, considerando que, em geral, o crescimento microbiano é menor à medida que a acidez aumenta. Porém, ao final do processo (região destacada na Figura), para valores de inativações maiores que aproximadamente -1.82 , devido à limitação do tempo de tratamento para o suco de uva em 50us, a inativação no suco de uva se torna maior, em virtude do maior tempo de tratamento especificado para este tipo de suco, em virtude das questões térmicas abordadas na Seção 5.3.3.

Considerando a Equação 5.4 referente ao campo elétrico em função das variáveis tensão aplicada e raio do eletrodo interno, os parâmetros do modelo de *Weibull* para a bactéria *E. coli* e as restrições das variáveis do problema, incluindo as diferentes faixas do tempo de tratamento para os sucos de uva e laranja em razão das diferentes condutividades, a formulação do problema de otimização multiobjetivo para o estudo de caso pode ser

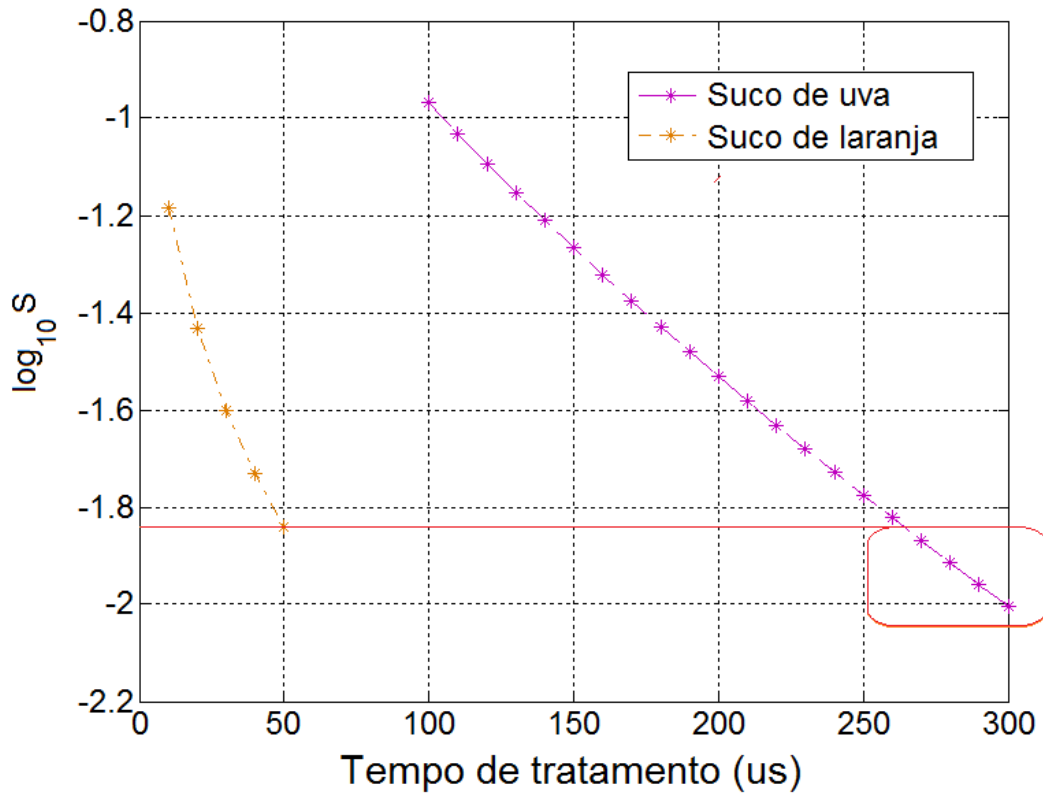


Figura 5.29 – Inativação microbiana para *E. coli* em função do tempo de tratamento para sucos de uva e laranja ($E = 21kV/cm$)

expressa por:

$$\begin{aligned} & \min(f_1, f_2) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 16 \leq V \leq 24kV \\ 100 \leq t \leq 300us(\text{suco de uva}) \\ 10 \leq t \leq 50us(\text{suco de laranja}) \\ 0.5 \leq r_i \leq 1cm \end{cases} \end{aligned} \quad (5.9)$$

A Figura 5.30 apresenta uma comparação de curvas Pareto estimadas para os dois tipos de suco. Apesar do menor tempo de tratamento do suco de laranja, em função da limitação do número de pulsos para não exceder a temperatura de $45^\circ C$ especificada para o estudo, observa-se resultados relativamente melhores para este tipo de suco até aproximadamente $75kJ/kg$, ou seja, maiores inativações microbianas com menor consumo energético. Isto pode ser explicado pela menor resistência da bactéria *E. coli* no suco de laranja em relação ao suco de uva, conforme apresentado na Figura 5.29. A partir de $75kJ/kg$, o suco de uva apresenta melhores resultados, já que o tempo de tratamento se torna preponderante em relação à resistência do microrganismo ao tratamento.

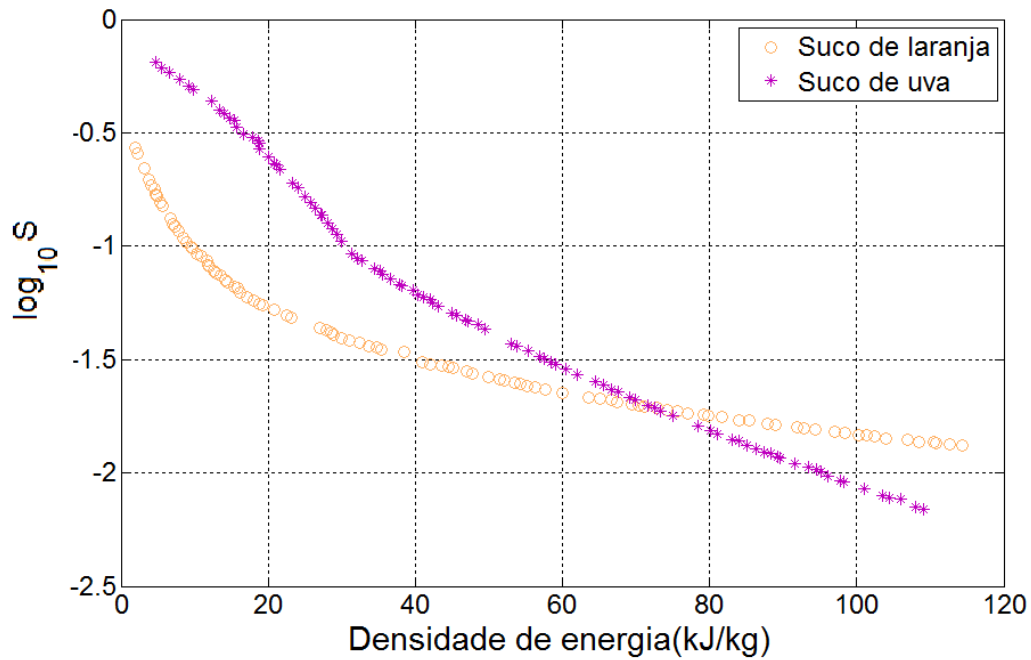


Figura 5.30 – Curvas Pareto estimadas para diferentes tipos de suco

Os resultados deste estudo de caso mostram o efeito da limitação do número de pulsos devido ao efeito térmico na eficiência do sistema, considerando que, mesmo a bactéria *E. coli* possuindo uma menor resistência ao tratamento para o suco de laranja (meio mais ácido), as inativações são maiores no suco de uva para valores de densidade de energia nas curvas Pareto estimadas acima de 75 kJ/kg .

5.4.3 Estudo de caso 3: Sistemas em Cascata

Dependendo dos requisitos do processo de tratamento, pode ser necessário aumentar a inativação microbiana. No estudo de caso 1, por exemplo, de acordo com a curva Pareto estimada obtida para a bactéria *E. coli* em suco de uva, uma inativação microbiana de -2.2 pode ser obtida para densidade de energia de aproximadamente 115 kJ/kg . Observa-se ainda que, até o ponto de saturação do campo elétrico, é possível aumentar a inativação microbiana com menor densidade de energia.

Uma das opções para aumento da inativação microbiana, respeitando as restrições do problema em relação aos limites das variáveis, é a conexão de câmaras de tratamento em cascata, inserindo um sistema de resfriamento do líquido entre as mesmas, de forma que o líquido não ultrapasse o limite térmico de 45°C especificado para o estudo, conforme mostrado na Figura 5.31.

A formulação matemática do problema de otimização multiobjetivo para o estudo

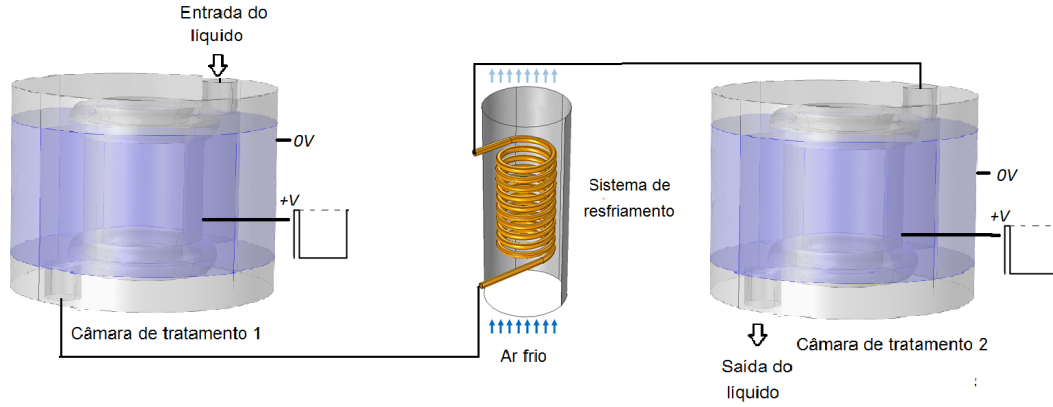


Figura 5.31 – Sistema de tratamento de dois estágios

de caso, considerando a inativação da bactéria *E. coli* em suco de uva, é dada por:

$$\begin{aligned} & \min(f_1, f_2) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 16 \leq V \leq 24kV \\ 100 \leq t \leq 300us(\text{suco de uva}) \\ 0.5 \leq r_i \leq 1cm \end{cases} \end{aligned} \quad (5.10)$$

A Figura 5.32 mostra as curvas Pareto estimada de um sistema de dois estágios em cascata para tratamento. Um primeiro estágio (pré-tratamento) pode ser implementado, por exemplo, aproveitando a região na qual há uma maior inativação microbiana com menor densidade de energia, selecionando o ponto de maior inativação microbiana da região, ou seja o ponto de saturação do campo elétrico com $V = 24kV$, $r_i = 1cm$ e $t = 100us$, resultando em uma inativação de -1.1 para uma densidade de energia de aproximadamente $30kJ/kg$. A curva Pareto estimada para o segundo estágio, apresenta os valores de inativação microbiana e densidade de energia acumulados. Conforme mostrado, o valor de inativação microbiana pode alcançar -3.2 , para uma densidade de energia próxima de $135kJ/kg$.

A Figura 5.33 apresenta as curvas Pareto estimadas para um sistema de três estágios, considerando a utilização das regiões de maior inativação microbiana com menores densidades de energia, ou seja, fixando o tempo de tratamento de cada estágio em $t = 100us$. Através da seleção do ponto de saturação do campo elétrico com $V = 24kV$ e $r_i = 1cm$ nos dois primeiros estágios, é possível alcançar uma inativação microbiana de até -3.1 ao final do terceiro estágio, ou seja, muito próxima da inativação microbiana do sistema com dois estágios, porém com uma densidade de energia de $90kJ/kg$ (33% menor). Desta forma, aproveitando a região com maiores inativações microbianas, é possível obter inativações maiores através da conexão de mais estágios, com uma menor densidade de energia. A análise de viabilidade do ponto de vista de custo de implementação de sistemas em cascata

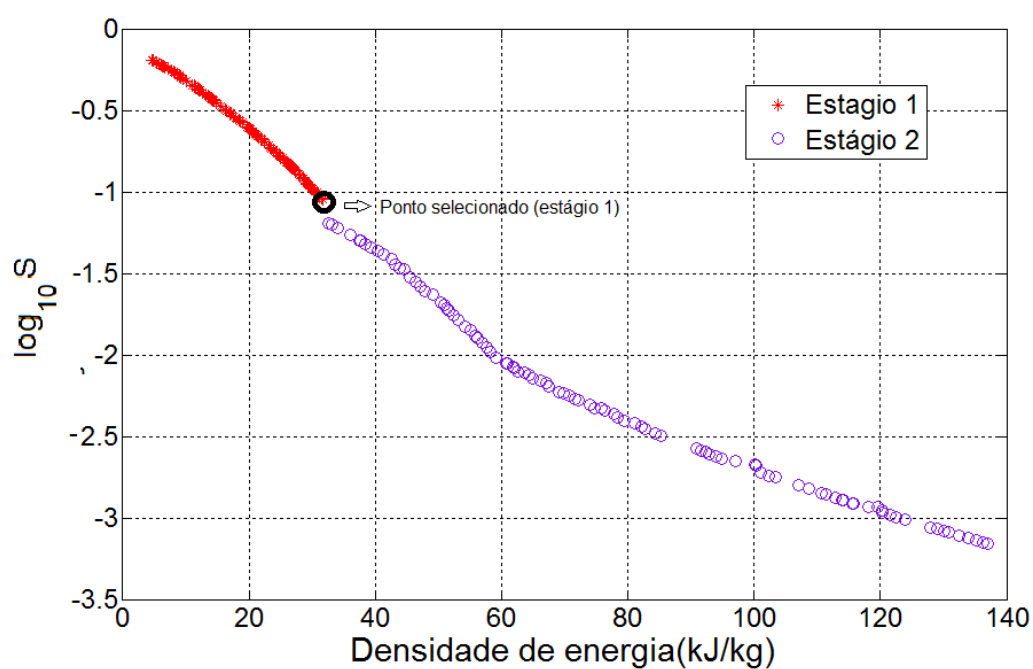


Figura 5.32 – Curvas Pareto estimadas para sistema de dois estágios em cascata

deve ser realizada no sentido de avaliar o tempo de retorno do investimento num sistema PEF de maior porte.

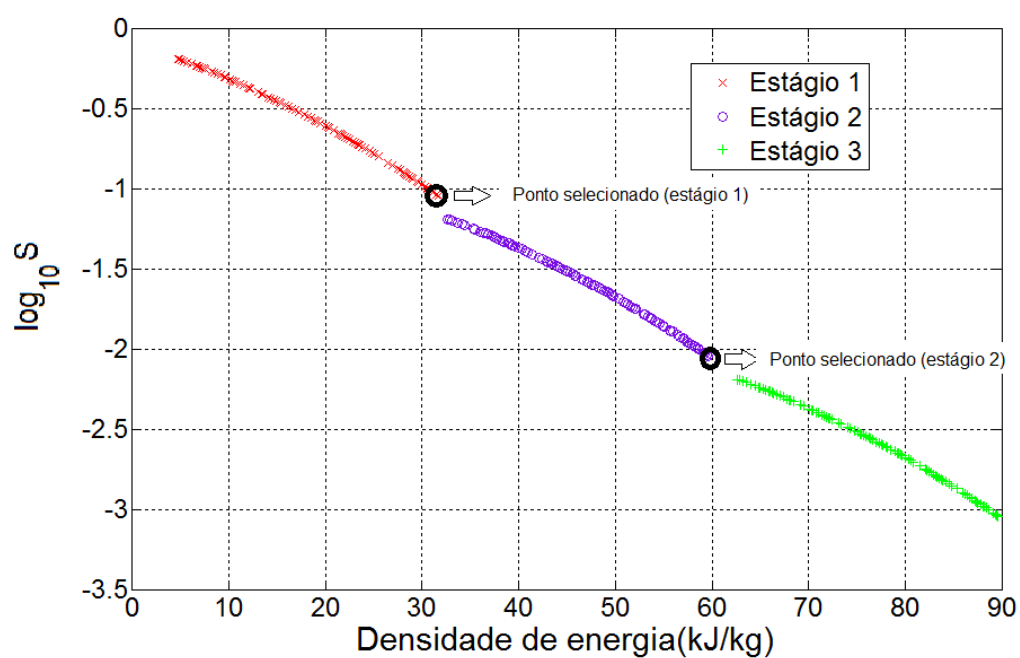


Figura 5.33 – Curvas Pareto estimadas para sistemas de três estágios em cascata

5.4.4 Estudo de caso 4: Comparação entre Modelos de Predição

Este estudo de caso tem como objetivo analisar as curvas Pareto estimadas obtidas pelo modelo computacional dinâmico para os modelos de predição de *Hulsheger e Niemman* e de *Weibull*, os quais foram abordados na Seção 2.8, considerando a bactéria *E. coli* em sucos de laranja. A adequação do modelo computacional a outros modelos de predição é relevante no sentido de que dados reportados na literatura referente a líquidos/microrganismos podem se referir a outro modelo diferente do modelo de *Weibull* utilizado na modelagem dinâmica.

Para este estudo de caso, os parâmetros de cada modelo de predição foram extraídos de (RIVAS et al., 2006). Nos dados reportados, foram utilizados os parâmetros da Equação 2.4 para o modelo de *Hulsheger e Niemman* e da Equação 2.7 para o modelo de *Weibull*, sendo que os valores dos parâmetros referentes ao modelo de *Weibull* para a bactéria *E. coli* em sucos de laranja apresentados anteriormente na Tabela 5.11. Para os resultados de inativação da bactéria *E. coli* em sucos de laranja ajustados ao modelo de predição de *Hulsheger e Niemman* em (RIVAS et al., 2006), foram gerados dados de t_c (tempo crítico) e b_t (coeficiente da Equação 2.4). Considerando a variação do parâmetro t_c com o campo elétrico, foi obtida expressão para determinação deste parâmetro, conforme Equação 5.11. Os parâmetros A_0 a A_2 resultantes do ajuste dos dados à uma função polinomial do segundo grau são apresentados na Tabela 5.12. O valor de b_{tav} foi calculado como sendo a média dos valores de b_t reportados em (RIVAS et al., 2006), considerando sua baixa variação com o campo elétrico,

$$t_c = A_0 + A_1E + A_2E^2 \quad (5.11)$$

<i>E. coli</i> (suco de laranja)			
A_0	A_1	A_2	b_{tav}
18.49	-1.05	1.58×10^{-2}	1.58

Tabela 5.12 – Parâmetros do modelo de *Hulsheger e Niemman* para bactéria *E. coli* em sucos laranja

A formulação matemática do problema de otimização multiobjetivo para o estudo de caso e apresentada na Equação 5.12, considerando a restrição de tempo de tratamento para o suco de laranja:

$$\begin{aligned} & \min(f_1, f_2) \\ & \text{sujeito a } \begin{cases} 16 \leq V \leq 24kV \\ 10 \leq t \leq 50us(\text{suco de laranja}) \\ 0.5 \leq r_i \leq 1cm \end{cases} \end{aligned} \quad (5.12)$$

Conforme apresentado na Figura 5.34, para a faixa de inativação microbiana entre -0.8 e -1.9 , a maior diferença entre as inativações microbianas foi de aproximadamente -0.15 . Desta forma, o conjunto de soluções não dominadas para os dois modelos tiveram uma aproximação aceitável nesta faixa. Para valores de inativação mais baixos, o algoritmo de otimização gerou soluções para o modelo de *Hulsheger e Niemman* com valores relativamente mais baixos de inativação para uma mesma densidade de energia em relação ao modelo de *Weibull*. Desta forma, nesta faixa, utilizando o modelo de *Weibull*, seria possível selecionar soluções mais interessantes do ponto de vista de eficiência do sistema.

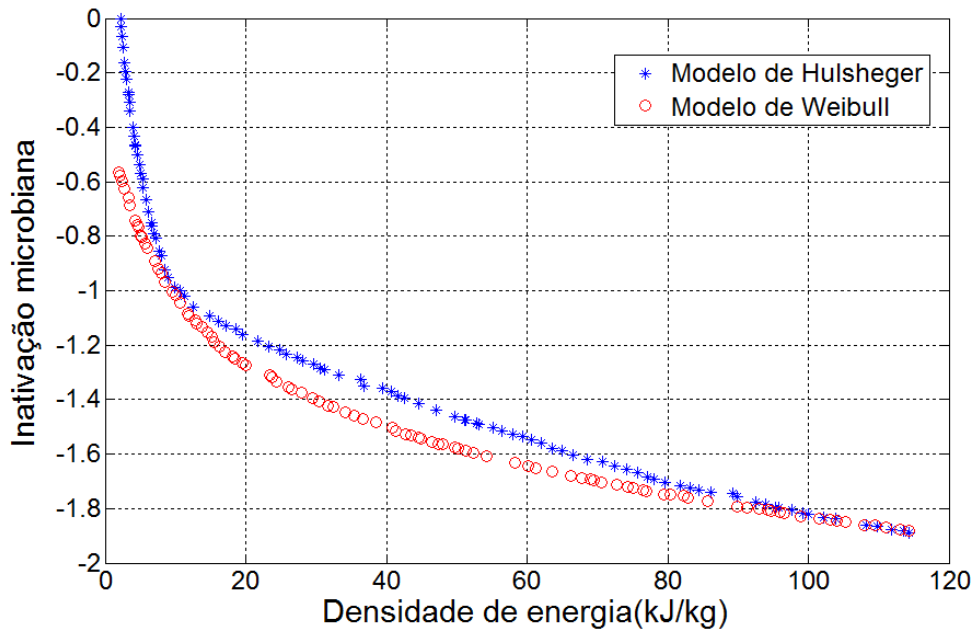


Figura 5.34 – Comparação entre modelos de predição de *Weibull* e *Hulsheger e Niemman*

5.5 Considerações Finais

Neste capítulo foram apresentados os resultados das simulações em sistemas estáticos e, posteriormente, para sistemas dinâmicos. Através da comparação entre geometrias apresentado nas simulações com sistemas estáticos, foi possível verificar uma maior eficiência da geometria coaxial, em consequência de uma distribuição de campo elétrico mais uniforme em relação aos demais arranjos. Para a geometria coaxial, foi obtida inativação próxima de -6 , para uma densidade de energia de aproximadamente 500 kJ/kg . Mesmo considerando que o limite térmico não foi aplicado nas simulações prévias, o que eleva os níveis de inativação e densidade de energia, esta etapa foi relevante para definição de uma geometria base para as simulações dinâmicas, nas quais a análise de temperatura foi incorporada.

Nas simulações para sistemas dinâmicos, a incorporação da análise térmica permitiu uma análise mais realista de um sistema PEF, considerando a limitação do número de pulsos em função da elevação de temperatura no líquido. Através da análise fluidodinâmica, foi possível calcular a velocidade de cada fluido e sincronizar com a frequência da fonte de alta tensão, o que serve para assegurar que o escoamento do fluido esteja sincronizado com a frequência dos pulsos. Na análise de campo elétrico, para uma condição de campo máximo no líquido de $50kV/cm$, foi possível correlacionar as variáveis de tensão aplicada e raio do eletrodo interno, as quais impactam na distribuição de campo elétrico, com três parâmetros importantes para a eficiência do tratamento de um sistema PEF: inativação microbiana, densidade de energia e uniformidade do campo elétrico. O aumento do raio do eletrodo interno, por exemplo, favorece a inativação microbiana e a uniformidade do campo, porém aumenta o consumo energético e, além disso, reduz o volume de líquido tratado. As análises computacionais envolvendo os parâmetros citados são relevantes para que o projetista tenha uma melhor compreensão do comportamento das mesmas em função das variáveis analisadas.

A aplicação da metodologia computacional para sistemas dinâmicos nos estudos de caso possibilitou levantar soluções para os objetivos conflitantes de inativação e densidade de energia, considerando situações reais que fazem parte de um projeto de uma câmara de tratamento, ou seja, a análise do sistema com diferentes líquidos, microrganismos, etc. Com base na solução adotada, o projetista pode, por exemplo, elaborar protocolos de operação do sistema em função do produto líquido a ser processado. De uma forma geral, os resultados dos estudos de caso mostraram que as diferentes condutividades e resistências dos microrganismos impactam significativamente no conjunto de soluções Pareto estimadas, quando diferentes tipos de líquidos e/ou microrganismos são analisados. Além disso, é possível otimizar um sistema multi-estágios, realizando a opção por soluções ótimas aproximadas que favoreçam o aumento da inativação microbiana para o(s) estágio(s) inicial(is). A utilização de diferentes modelos de predição, considerando a aproximação aceitável dos resultados encontrados, aumenta a abrangência de aplicação do modelo computacional, considerando a possibilidade de utilizar dados de diferentes modelos de predição disponíveis na literatura.

Em relação ao impacto dos resultados de inativações microbianas no tempo de prateleira dos líquidos abordados, a população inicial de microrganismos, em conjunto com fatores específicos de cada produto/processo, tais como pH do líquido, temperatura de armazenamento, atividade de água, presença de ácidos orgânicos, embalagem, dentre outros, podem ser utilizados para estimativa do tempo de prateleira, mediante aplicação de modelos preditivos de crescimento microbiano. Desta forma, trata-se de uma análise específica de cada produto e processo.

O próximo capítulo apresenta as principais conclusões e as propostas de continuidade

de estudos.

6 Conclusões

Esta tese, de uma forma geral, apresentou uma nova metodologia computacional que possibilita ao projetista de uma câmara de tratamento de um sistema PEF analisar previamente o comportamento da inativação microbiana e densidade de energia em função de parâmetros de projeto e processo, considerando que estes dois parâmetros são fundamentais para a eficiência de um sistema PEF. Inicialmente, foram realizadas simulações com câmaras de tratamento estáticas, utilizando algoritmo implementado no MatLab^{MR} para cálculo de campo elétrico associado com algoritmo evolutivo multiobjetivo NSGA-II. As simulações para sistemas dinâmicos foram realizadas com o software COMSOL^{MR}, envolvendo o cálculo de campo elétrico acoplado com as análises térmica e de escoamento do fluido. Neste capítulo, são apresentadas as principais conclusões obtidas considerando as investigações realizadas através das simulações numéricas, além de propostas para continuidade de estudos.

6.1 Principais Conclusões

- Os sistemas estáticos normalmente são utilizados para ensaios prévios em câmaras de tratamento, sendo que o objetivo principal é a análise da distribuição de campo elétrico dentro da câmara, sem considerar o escoamento do fluido e a análise térmica. Nas simulações com câmaras de tratamento estáticas, uma geometria coaxial apresentou melhores resultados do que as geometrias com arranjos de eletrodos plano paralelos e cilíndricos tipo *needle*. As zonas com enfraquecimento de campo elétrico atrás dos eletrodos reduzem a inativação microbiana nos arranjos com eletrodos planos paralelos e cilíndricos, o que não ocorre com a geometria coaxial;

- A análise da dinâmica do fluido, considerando um escoamento laminar, foi relevante para determinação do tempo de trânsito do fluido dentro da câmara de tratamento. A frequência dos pulsos para cada tipo de suco foi definida em função do tempo de trânsito dentro da câmara, considerando que estes parâmetros devem ser sincronizados de forma que o líquido em tratamento seja submetido a todos os pulsos configurados durante o tempo que escoar dentro da região efetiva de tratamento. Para o suco de laranja, foi calculada frequência de $76.9Hz$ e para o suco de uva de $57.7Hz$, considerando as diferentes propriedades de cada tipo de líquido;

- Através da análise térmica, foi possível limitar o número de pulsos e, consequentemente, o tempo de tratamento para os líquidos analisados. Para o suco de laranja, por exemplo, devido à sua maior condutividade térmica em relação ao suco de uva, o tempo de tratamento foi limitado a $50\mu s$, considerando um limite de temperatura média de $45^{\circ}C$

no interior do líquido;

- A uniformidade do campo elétrico é relevante para o tratamento homogêneo do líquido dentro da câmara. Através do cálculo do coeficiente de variação (CV) para a distribuição de campo elétrico, foi obtida uniformidade do campo elétrico em função do raio do eletrodo interno da geometria coaxial. O valor de CV é menor, indicando uma maior uniformidade, à medida que o raio do eletrodo interno da geometria coaxial se torna maior, porém é necessário levar em consideração o aumento de consumo energético e a redução de capacidade de processamento do sistema;

- A análise numérica da eficiência de uma câmara de tratamento para diferentes microrganismos, considerando um mesmo líquido, é relevante no sentido de comparar a inativação microbiana e a densidade de energia previamente aos ensaios experimentais. Nas simulações computacionais com suco de uva, a bactéria *E. coli* apresentou uma inativação microbiana de 0.4 log menor do que a bactéria *S. aureus*, para uma densidade de energia da ordem de 110 KJ/kg, indicando uma maior resistência da bactéria *E. coli* ao tratamento. Através das curvas Pareto estimadas, foi possível selecionar soluções para as duas bactérias para análise, priorizando a inativação microbiana ou a densidade de energia, ou seja, dando opções ao projetista para a seleção do ponto de operação do sistema em função das especificações de cada processo;

- A comparação dos resultados obtidos para as bactérias *E. coli* e *S. aureus* em sucos de uva com dados da literatura reportados em (HUANG et al., 2014), mostraram uma aproximação aceitável para baixas inativações. As diferenças de inativação entre os dados computacionais e da literatura, à medida que a densidade de energia aumenta, podem ser justificadas em razão das diferentes faixas de temperatura consideradas, o que impacta na condutividade do líquido e, conseqüentemente, na densidade de energia do líquido;

- A metodologia computacional desenvolvida permite avaliar diferentes tipos de líquidos para uma mesma câmara de tratamento. Na comparação entre diferentes tipos de sucos (uva e laranja) para tratamento da bactéria *E. coli*, apesar da limitação do tempo de tratamento em 50us para o suco de laranja, em razão da sua maior condutividade quando comparado com suco de uva, os resultados mostraram uma eficiência maior para o tratamento em suco de laranja, em função da menor resistência da bactéria *E. coli* para este tipo de suco (mais ácido), até o valor de densidade de energia igual a 75kJ/kg. A partir deste ponto, o tempo de tratamento se torna preponderante em relação à resistência do microrganismo e, neste caso, como o tempo de tratamento para o suco de laranja é menor em função da limitação térmica, a eficiência para o suco de uva é maior. Desta forma, a ferramenta computacional permite correlacionar a eficiência do sistema do ponto de vista microbiológico e energético com as especificidades de cada líquido, o que é relevante para o projeto e elaboração de protocolos de operação para um sistema PEF;

- O modelo computacional pode ser utilizado para buscar soluções ótimas aproximadas para projeto de sistemas multi-estágios através da seleção de ponto de operação do conjunto de soluções de cada estágio que atenda aos níveis totais de inativação microbiana e densidade de energia requeridos. Através da conexão de três estágios, por exemplo, é possível alcançar inativações de -3.1 com densidade de energia de aproximadamente $90kJ/kg$, ou seja, um sistema mais eficiente do que o de dois estágios apresentado, no qual a seleção de um nível de inativação de -3.2 pode ser alcançada com densidade de $140kJ/kg$;

- A comparação entre modelos de predição de *Weibull* e *Hulsheger e Niemman* para a bactéria *E. coli* em sucos de laranja mostrou uma aproximação aceitável do conjunto de soluções ótimas aproximadas entre os dois modelos para inativações acima de -0.8 . Para valores de inativação mais baixos, é possível selecionar soluções mais eficientes utilizando o modelo de *Weibull*, ou seja, maiores inativações para uma mesma densidade de energia.

6.2 Proposta de Continuidade de Estudos

A seguir são apresentadas algumas propostas de trabalhos futuros para complementação dos estudos realizados:

- Realizar estudos experimentais considerando a câmara de tratamento com geometria coaxial para diferentes raios de eletrodo. Nos estudos experimentais, realizar ajustes das variáveis de tensão aplicada e tempo de tratamento da aplicação dos pulsos, comparando com os resultados das curvas Pareto estimadas, para diferentes tipos de líquidos e microrganismos;

- Realizar simulações considerando regime de escoamento turbulento, já que a turbulência no escoamento do fluido aumenta o coeficiente de transferência de calor e pode reduzir as zonas de temperaturas elevadas dentro da câmara de tratamento, evitando a degradação das propriedades nutricionais do líquido nas regiões com maior aquecimento. Neste caso, deve ser levado em consideração também o atrito do escoamento do fluido com as paredes da câmara de tratamento, o que pode elevar a temperatura nestas regiões;

- Avaliar computacionalmente a eficiência do sistema para aplicação de diferentes formas de onda (triangular, exponencial, etc) e analisar o impacto na inativação microbiana e densidade de energia;

- Incorporar sistema de controle de temperatura na câmara de tratamento de forma a reduzir a temperatura do líquido em tratamento, de maneira que seja possível aumentar o número de pulsos aplicados e, conseqüentemente, melhorar a eficiência do sistema do ponto de vista de inativação microbiana;

- Aplicar o modelo computacional em outras câmaras de tratamento reportadas

na literatura e avaliar os resultados para diferentes cargas do sistema (tipos de líquidos e microrganismos).

Referências

- ALKHAFAJI, S. R.; FARID, M. An investigation on pulsed electric fields technology using new treatment chamber design. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 8, n. 2, p. 205–212, 2007. Citado 3 vezes nas páginas [x](#), [16](#) e [17](#).
- ALVAREZ, I.; CONDON, S.; RASO, J. Microbial inactivation by pulsed electric fields. In: *Pulsed electric fields technology for the food industry*. [S.l.]: Springer, 2006. p. 97–129. Citado na página [12](#).
- ALVAREZ, I. et al. Comparing predicting models for the escherichia coli inactivation by pulsed electric fields. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 4, n. 2, p. 195–202, 2003. Citado 2 vezes nas páginas [11](#) e [21](#).
- ANEJA, K. R. et al. Microbes associated with freshly prepared juices of citrus and carrots. *International journal of food science*, Hindawi, v. 2014, 2014. Citado na página [15](#).
- ARAUJO, E.; LOPES, I.; RAMIREZ, J. Comparison of electrodes arrangements of a high voltage pulsed electric field system for liquid sterilization using fem coupled with multi-objective optimization. In: *Proc. 20th International Symposium on High Voltage Engineering (ISH), Buenos Aires, Argentina*. [S.l.: s.n.], 2017. p. 1–6 (Paper ID:199). Citado 2 vezes nas páginas [41](#) e [47](#).
- ÁVILA, S. L. et al. Otimização multiobjetivo e análise de sensibilidade para concepção de dispositivos: aplicação: síntese de antenas refletoras para comunicação via satélite. Florianópolis, SC, 2006. Citado na página [35](#).
- BARBOSA-CANOVAS, G. V. et al. *Preservation of foods with pulsed electric fields*. [S.l.]: Elsevier, 1999. Citado na página [10](#).
- BASTOS, J. P. A.; SADOWSKI, N. *Electromagnetic modeling by finite element methods*. [S.l.]: CRC press, 2003. Citado na página [32](#).
- BATCHELOR, G. K. *An introduction to fluid dynamics*. [S.l.]: Cambridge university press, 2000. Citado 3 vezes nas páginas [56](#), [57](#) e [58](#).
- BATHE, K.-J. *Finite element procedures*. [S.l.]: Klaus-Jurgen Bathe, 2006. Citado na página [30](#).
- BEJAN, A.; KRAUS, A. D. *Heat transfer handbook*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2003. v. 1. Citado na página [55](#).
- BRASIL, A. Resolução rdc no. 12.(de 02 de janeiro de 2001). *Estabelece Padrões Microbiológicos para Alimentos*, 2001. Citado na página [16](#).
- BUCKOW, R.; NG, S.; TOEPFL, S. Pulsed electric field processing of orange juice: a review on microbial, enzymatic, nutritional, and sensory quality and stability. *Comprehensive reviews in food science and food safety*, Wiley Online Library, v. 12, n. 5, p. 455–467, 2013. Citado na página [7](#).

- BUCKOW, R. et al. Simulation and evaluation of pilot-scale pulsed electric field (pef) processing. *Journal of Food Engineering*, Elsevier, v. 101, n. 1, p. 67–77, 2010. Citado 4 vezes nas páginas 19, 20, 78 e 81.
- BURGAIN-CHAIN, A.; SCHERMAN, D. Dna electrotransfer: An effective tool for gene therapy. *Gene Therapy-Tools and Potential Applications*, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 10.
- CEBRIÁN, G. et al. Resistance of escherichia coli grown at different temperatures to various environmental stresses. *Journal of applied microbiology*, Wiley Online Library, v. 105, n. 1, p. 271–278, 2008. Citado na página 23.
- DEB, K. *Multi-objective optimization using evolutionary algorithms*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2001. v. 16. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 36.
- DEB, K. et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: Nsga-ii. *IEEE transactions on evolutionary computation*, IEEE, v. 6, n. 2, p. 182–197, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 36 e 37.
- DŁUGOSZ, A.; BURCZYŃSKI, T. Multiobjective shape optimization of selected coupled problems by means of evolutionary algorithms. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences: Technical Sciences*, v. 60, n. 2, p. 215–222, 2012. Citado na página 37.
- DOEVENSPECK, H. Influencing cells and cell walls by electrostatic impulses. *Fleischwirtschaft*, v. 13, n. 12, p. 968–987, 1961. Citado na página 6.
- EL-HAG, A. H. et al. A performance study of a multilevel electrode treatment chamber for food processing. *IEEE Transactions on Industry Applications*, IEEE, v. 49, n. 3, p. 1091–1097, 2013. Citado na página 16.
- EVRENDILEK, G. A.; ZHANG, Q. Effects of pulse polarity and pulse delaying time on pulsed electric fields-induced pasteurization of e. coli o157: H7. *Journal of Food Engineering*, Elsevier, v. 68, n. 2, p. 271–276, 2005. Citado na página 10.
- FIALA, A. et al. Coupled electrical-fluid model of pulsed electric field treatment in a model food system. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 2, n. 4, p. 229–238, 2001. Citado na página 19.
- FIGUEIREDO, R. *Guia prático para evitar doenças veiculadas por alimentos (dva)*. [S.l.]: Barueri: Manole, 2a edição, 2003. Citado na página 15.
- FONSECA, C. M.; FLEMING, P. J. et al. Genetic algorithms for multiobjective optimization: Formulation discussion and generalization. In: CITESEER. *ICGA*. [S.l.], 1993. v. 93, p. 416–423. Citado na página 36.
- FORSYTHE, S. J. *Microbiologia da segurança dos alimentos*. [S.l.]: Artmed Editora, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 15.
- GAD, A.; JAYARAM, S. H. Processing of carbonated beer by pulsed electric fields. *IEEE Transactions on Industry Applications*, IEEE, v. 51, n. 6, p. 4759–4765, 2015. Citado 3 vezes nas páginas x, 6 e 18.

- GARCÍA, D. et al. Pulsed electric fields cause sublethal injury in escherichia coli. *Letters in applied microbiology*, Wiley Online Library, v. 36, n. 3, p. 140–144, 2003. Citado na página 13.
- GARCÍA, D. et al. Bacterial resistance after pulsed electric fields depending on the treatment medium ph. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 6, n. 4, p. 388–395, 2005. Citado na página 15.
- GERLACH, D. et al. Numerical simulations of pulsed electric fields for food preservation: a review. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 9, n. 4, p. 408–417, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.
- GEVEKE, D.; KOZEMPEL, M. Pulsed electric field effects on bacteria and yeast cells1. *Journal of food processing and preservation*, Wiley Online Library, v. 27, n. 1, p. 65–72, 2003. Citado na página 12.
- GIANCOLI, D. C. *Physics: principles with applications*. [S.l.]: Pearson Education, 2005. Citado na página 42.
- GOLDBERG, D. E.; HOLLAND, J. H. Genetic algorithms and machine learning. *Machine learning*, Springer, v. 3, n. 2, p. 95–99, 1988. Citado na página 36.
- GÓNGORA-NIETO, M. et al. Impact of air bubbles in a dielectric liquid when subjected to high field strengths. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 4, n. 1, p. 57–67, 2003. Citado na página 19.
- HAUPT, R. L.; HAUPT, S. E. *Practical genetic algorithms*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004. Citado na página 35.
- HEINZ, V.; KNORR, D. Effect of ph, ethanol addition and high hydrostatic pressure on the inactivation of bacillus subtilis by pulsed electric fields. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 1, n. 2, p. 151–159, 2000. Citado na página 13.
- HEINZ, V.; TOEPFL, S.; KNORR, D. Impact of temperature on lethality and energy efficiency of apple juice pasteurization by pulsed electric fields treatment. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 4, n. 2, p. 167–175, 2003. Citado na página 13.
- HORN, J.; NAFPLIOTIS, N.; GOLDBERG, D. E. A niched pareto genetic algorithm for multiobjective optimization. In: IEEE. *Evolutionary Computation, 1994. IEEE World Congress on Computational Intelligence., Proceedings of the First IEEE Conference on*. [S.l.], 1994. p. 82–87. Citado na página 36.
- HUANG, K. et al. A review of kinetic models for inactivating microorganisms and enzymes by pulsed electric field processing. *Journal of food engineering*, Elsevier, v. 111, n. 2, p. 191–207, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 23.
- HUANG, K.; WANG, J. Designs of pulsed electric fields treatment chambers for liquid foods pasteurization process: A review. *Journal of Food Engineering*, Elsevier, v. 95, n. 2, p. 227–239, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 23.

- HUANG, K. et al. Coupled simulations in colinear and coaxial continuous pulsed electric field treatment chambers. *Transactions of the ASABE*, American Society of Agricultural and Biological Engineers, v. 56, n. 4, p. 1473–1484, 2013. Citado 3 vezes nas páginas 3, 8 e 21.
- HUANG, K. et al. Comparing the pulsed electric field resistance of the microorganisms in grape juice: Application of the weibull model. *Food Control*, Elsevier, v. 35, n. 1, p. 241–251, 2014. Citado 11 vezes nas páginas xii, 3, 6, 23, 63, 88, 94, 95, 96, 97 e 108.
- HÜLSHEGER, H.; NIEMANN, E.-G. Lethal effects of high-voltage pulses on e. coli k12. *Radiation and Environmental Biophysics*, Springer, v. 18, n. 4, p. 281–288, 1980. Citado na página 22.
- HÜLSHEGER, H.; POTEL, J.; NIEMANN, E.-G. Killing of bacteria with electric pulses of high field strength. *Radiation and Environmental Biophysics*, Springer, v. 20, n. 1, p. 53–65, 1981. Citado 3 vezes nas páginas 7, 22 e 45.
- HÜLSHEGER, H.; POTEL, J.; NIEMANN, E.-G. Electric field effects on bacteria and yeast cells. *Radiation and environmental biophysics*, Springer, v. 22, n. 2, p. 149–162, 1983. Citado na página 22.
- IBARZ, A.; GONZALEZ, C.; ESPLUGAS, S. Rheology of clarified fruit juices. iii: Orange juices. *Journal of Food Engineering*, Elsevier, v. 21, n. 4, p. 485–494, 1994. Citado na página 52.
- JAYARAM, S. H. Sterilization of liquid foods by pulsed electric fields. *IEEE Electrical Insulation Magazine*, IEEE, v. 16, n. 6, p. 17–25, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 9 e 12.
- JEANTET, R. et al. High intensity pulsed electric fields applied to egg white: effect on salmonella enteritidis inactivation and protein denaturation. *Journal of Food Protection®*, International Association for Food Protection, v. 62, n. 12, p. 1381–1386, 1999. Citado na página 13.
- KAYE, J. A. M.; FRANGO, A. A strategic methodology to the use of advanced statistical quality improvement techniques. *The TQM magazine*, MCB UP Ltd, v. 10, n. 3, p. 169–176, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 29.
- KEMPKES, M.; SIMPSON, R.; ROTH, I. Removing barriers to commercialization of pef systems and processes. *Proceedings of 3rd School on Pulsed Electric Field Processing of Food. Institute of Food and Health, University College Dublin, Dublin*, p. 1–6, 2016. Citado na página 25.
- KEMPKES, M. A. Industrial pulsed electric field systems. *Handbook of Electroporation*, Springer, p. 1–21, 2017. Citado na página 25.
- KNOERZER, K.; BAUMANN, P.; BUCKOW, R. An iterative modelling approach for improving the performance of a pulsed electric field (pef) treatment chamber. *Computers & Chemical Engineering*, Elsevier, v. 37, p. 48–63, 2012. Citado 5 vezes nas páginas 3, 6, 20, 78 e 83.
- KOTNIK, T. et al. Cell membrane electroporation by symmetrical bipolar rectangular pulses: Part i. increased efficiency of permeabilization. *Bioelectrochemistry*, Elsevier, v. 54, n. 1, p. 83–90, 2001. Citado na página 14.

- KUMAR, Y.; PATEL, K. K.; KUMAR, V. Pulsed electric field processing in food technology. *International Journal of Engineering Studies and Technical Approach*, v. 1, n. 2, p. 6–17, 2015. Citado na página 25.
- LI, N. et al. Electric field analysis and optimal design of inner electrodes for hvdc wall bushing. In: IEEE. *2015 IEEE 11th International Conference on the Properties and Applications of Dielectric Materials (ICPADM)*. [S.l.], 2015. p. 684–687. Citado na página 36.
- LINDGREN, M. et al. Simulation of the temperature increase in pulsed electric field (pef) continuous flow treatment chambers. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 3, n. 3, p. 233–245, 2002. Citado na página 19.
- LOEFFLER, M. J. Generation and application of high intensity pulsed electric fields. In: *Pulsed Electric Fields Technology for the Food Industry*. [S.l.]: Springer, 2006. p. 27–72. Citado 3 vezes nas páginas 12, 51 e 71.
- LUNDSTEDT, T. et al. Experimental design and optimization. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, Elsevier, v. 42, n. 1, p. 3–40, 1998. Citado na página 28.
- MACEDO, A. Eletromagnetismo. *Editora Guanabara Dois*, 1988. Citado na página 31.
- MARTÍN-BELLOSO, O.; SOBRINO-LÓPEZ, A. Combination of pulsed electric fields with other preservation techniques. *Food and Bioprocess Technology*, Springer, v. 4, n. 6, p. 954–968, 2011. Citado na página 25.
- MIETTINEN, K. *Nonlinear multiobjective optimization*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. v. 12. Citado na página 34.
- MIKŠ-KRAJNÍK, M. et al. Ensuring food security through enhancing microbiological food safety. *Cosmos*, World Scientific, v. 11, n. 01, p. 69–97, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 6 e 54.
- MOHAMED, M. E.; AYMAN, H.; EISSA, A. *Pulsed electric fields for food processing technology*. [S.l.]: INTECH Open Access Publisher, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 12.
- MONTGOMERY, D. C. *Design and analysis of experiments*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 28.
- MUNOZ, S. et al. Transmembrane voltage induced on altered erythrocyte shapes exposed to rf fields. *Bioelectromagnetics*, Wiley Online Library, v. 25, n. 8, p. 631–633, 2004. Citado na página 14.
- OLIVEIRA, L.; OLIVEIRA, N.; SILVA, M. Determinação experimental do calor específico do suco de laranja. *Blucher Chemical Engineering Proceedings*, v. 1, n. 2, p. 4094–4101, 2015. Citado na página 1.
- PAGAN, R.; MAÑAS, P. Fundamental aspects of microbial membrane electroporation. In: *Pulsed electric fields technology for the food industry*. [S.l.]: Springer, 2006. p. 73–94. Citado 2 vezes nas páginas x e 14.
- PASSOS, M. L.; RIBEIRO, C. P. *Innovation in food engineering: New techniques and products*. [S.l.]: CRC Press, 2016. 28–29 p. Citado na página 7.

- PELEG, M. A model of microbial survival after exposure to pulsed electric fields. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, Wiley Online Library, v. 67, n. 1, p. 93–99, 1995. Citado na página 23.
- PEÑA, M. Morales-de L.; ELEZ-MARTÍNEZ, P.; MARTÍN-BELLOSO, O. Food preservation by pulsed electric fields: an engineering perspective. *Food Engineering Reviews*, Springer, v. 3, n. 2, p. 94–107, 2011. Citado 4 vezes nas páginas 2, 16, 24 e 47.
- PERALTA-ZAMORA, P.; MORAIS, J. L. d.; NAGATA, N. Por que otimização multivariada? *Eng. sanit. ambient*, v. 10, n. 2, p. 106–110, 2005. Citado na página 28.
- PUCIHAR, G. et al. The influence of medium conductivity on electroporation and survival of cells in vitro. *Bioelectrochemistry*, Elsevier, v. 54, n. 2, p. 107–115, 2001. Citado na página 12.
- QIN, B.-L. et al. *Continuous flow electrical treatment of flowable food products*. [S.l.]: Google Patents, 1998. US Patent 5,776,529. Citado 4 vezes nas páginas x, 13, 15 e 63.
- QIN, B.-L. et al. Inactivation of microorganisms by pulsed electric fields of different voltage waveforms. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, IEEE, v. 1, n. 6, p. 1047–1057, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 11.
- RASHED, N. et al. Microbiological study of vendor and packed fruit juices locally available in dhaka city, bangladesh. *International food research Journal*, v. 20, n. 2, 2013. Citado na página 16.
- RAYBAUDI-MASSILIA, R. M. et al. Control of pathogenic and spoilage microorganisms in fresh-cut fruits and fruit juices by traditional and alternative natural antimicrobials. *Comprehensive reviews in food science and food safety*, Wiley Online Library, v. 8, n. 3, p. 157–180, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 88.
- REDDY, J. N. *An introduction to the finite element method*. [S.l.]: McGraw-Hill New York, 1993. v. 2. Citado na página 30.
- RIVAS, A. et al. Nature of the inactivation of escherichia coli suspended in an orange juice and milk beverage. *European Food Research and Technology*, Springer, v. 223, n. 4, p. 541–545, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 98 e 103.
- RODRIGUEZ-GONZALEZ, O. et al. Energy requirements for alternative food processing technologies—principles, assumptions, and evaluation of efficiency. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, Wiley Online Library, v. 14, n. 5, p. 536–554, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 25.
- SALDAÑA, G. et al. Effect of temperature, ph and presence of nisin on inactivation of salmonella typhimurium and escherichia coli o157: H7 by pulsed electric fields. *Food Research International*, Elsevier, v. 45, n. 2, p. 1080–1086, 2012. Citado na página 15.
- SALDAÑA, G. et al. Evaluation of a static treatment chamber to investigate kinetics of microbial inactivation by pulsed electric fields at different temperatures at quasi-isothermal conditions. *Journal of Food Engineering*, Elsevier, v. 100, n. 2, p. 349–356, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 3, 20 e 83.

- SALE, A.; HAMILTON, W. Effects of high electric fields on microorganisms: I. killing of bacteria and yeasts. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-General Subjects*, Elsevier, v. 148, n. 3, p. 781–788, 1967. Citado na página 7.
- SAMPEDRO, F. et al. Cost analysis and environmental impact of pulsed electric fields and high pressure processing in comparison with thermal pasteurization. *Food and bioprocess technology*, Springer, v. 7, n. 7, p. 1928–1937, 2014. Citado na página 25.
- SCHAFFER, J. D. *Some experiments in machine learning using vector evaluated genetic algorithms*. [S.l.], 1985. Citado na página 36.
- SEPULVEDA, D. et al. Influence of treatment temperature on the inactivation of listeria innocua by pulsed electric fields. *LWT-Food Science and Technology*, Elsevier, v. 38, n. 2, p. 167–172, 2005. Citado na página 13.
- SESHADRI, A. Multi-objective optimization using evolutionary algorithms (moea). *Matlab Website: Http://www. Mathworks. com/matlabcentral/fileexchange/10429, by*, v. 19, 2006. Citado 4 vezes nas páginas 38, 47, 62 e 87.
- SILVA, M. D. C. da et al. Estudos de um compartimento cilíndrico em poliuretano para aplicação de pulso de campo elétrico em alimentos líquidos. *AMBIÊNCIA*, v. 3, n. 2, p. 183–192, 2009. Citado na página 1.
- SIMION, A. et al. Modeling of the thermo-physical properties of grapes juice i. thermal conductivity and thermal diffusivity. *Annals of Food Science and Technology*, v. 10, n. 2, p. 363–368, 2009. Citado na página 52.
- SIMION, A. I. et al. Modeling of the thermo-physical properties of grapes juice iii. viscosity and heat capacity. *Scientific Study & Research-Chemistry & Chemical Engineering, Biotechnology, Food Industry*, p. 409–420, 2011. Citado na página 52.
- SIMION, A. I. et al. Modeling of the thermo-physical properties of grapes juice ii. boiling point and density. *Scientific Study & Research-Chemistry and Chemical Engineering, Biotechnology, Food Industry*, v. 10, n. 4, p. 365–374, 2009. Citado na página 52.
- SINGH, J. et al. *Inactivation kinetic models for pulsed electric field treatment*. [S.l.]: Nova Science Publisher, 2016. Citado na página 24.
- SITZMANN, W.; VOROBIEV, E.; LBOVKA, N. Applications of electricity and specifically pulsed electric fields in food processing: Historical backgrounds. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, 2016. Citado na página 7.
- SRINIVAS, N.; DEB, K. Comparative study of vector evaluated ga and nsga applied to multiobjective optimization. In: *Proceedings of the Symposium on Genetic Algorithms*. [S.l.: s.n.], 1995. p. 83–90. Citado na página 36.
- STAMPFLI, R. Reversible electrical breakdown of the excitable membrane of a ranvier node. *An Acad Brasil Ciens*, v. 30, n. 1, p. 57–61, 1958. Citado na página 6.
- STOICA, M.; BAHRIM, G.; CÂRÂC, G. Factors that influence the electric field effects on fungal cells. *Science against microbial pathogens: communicating current research and technological advances*, p. 291–302, 2011. Citado 3 vezes nas páginas 12, 13 e 14.

- SWAMI, S. S. et al. Application of pulsed electric field in food processing. *International Journal of Agricultural Engineering*, Hind Agri-Horticultural Society, v. 3, n. 1, p. 171–174, 2010. Citado na página 2.
- TAKAHASHI, R. H. Otimização escalar e vetorial. 2011. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 36.
- TEISSIE, J.; GOLZIO, M.; ROLS, M. Mechanisms of cell membrane electroporation: a minireview of our present (lack of?) knowledge. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-General Subjects*, Elsevier, v. 1724, n. 3, p. 270–280, 2005. Citado na página 9.
- TEIXEIRA, L. J. Q. et al. Aplicação de campos elétricos pulsados de alta intensidade no processamento de suco de cenoura. Universidade Federal de Viçosa, 2008. Citado na página 1.
- TELFORD, J. K. A brief introduction to design of experiments. *Johns Hopkins apl technical digest*, v. 27, n. 3, p. 224–232, 2007. Citado na página 27.
- TELIS-ROMERO, J. et al. Thermophysical properties of brazilian orange juice as affected by temperature and water content. *Journal of Food Engineering*, Elsevier, v. 38, n. 1, p. 27–40, 1998. Citado na página 52.
- TOEPFL, S. Pulsed electric field food processing—industrial equipment design and commercial applications. *Stewart Postharvest Review*, Stewart Postharvest Solutions, v. 8, n. 2, p. 1–7, 2012. Citado na página 7.
- TOEPFL, S.; HEINZ, V.; KNORR, D. Overview of pulsed electric field processing for food. *Emerging technologies for food processing*, Elsevier, Oxford, p. 69–97, 2005. Citado na página 17.
- TOEPFL, S.; HEINZ, V.; KNORR, D. High intensity pulsed electric fields applied for food preservation. *Chemical engineering and processing: Process intensification*, Elsevier, v. 46, n. 6, p. 537–546, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 19.
- TOEPFL, S. et al. Potential of high hydrostatic pressure and pulsed electric fields for energy efficient and environmentally friendly food processing. *Food Reviews International*, Taylor & Francis, v. 22, n. 4, p. 405–423, 2006. Citado na página 2.
- VEGA-MERCADO, H. et al. Inactivation of escherichia coli by combining ph, ionic strength and pulsed electric fields hurdles. *Food Research International*, Elsevier, v. 29, n. 2, p. 117–121, 1996. Citado na página 12.
- WANG, H.; TU, C.; CHEN, K. Supplier selection and production planning by using guided genetic algorithm and dynamic nondominated sorting genetic algorithm ii approaches. *Mathematical Problems in Engineering*, Hindawi Publishing Corporation, v. 2015, 2015. Citado na página 37.
- WOUTERS, P. C.; ALVAREZ, I.; RASO, J. Critical factors determining inactivation kinetics by pulsed electric field food processing. *Trends in Food Science & Technology*, Elsevier, v. 12, n. 3, p. 112–121, 2001. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 12.
- YARMUSH, M. L. et al. Electroporation-based technologies for medicine: principles, applications, and challenges. *Biomedical Engineering*, v. 16, n. 1, p. 295, 2014. Citado na página 9.

- ZHANG, H. Electrical properties of foods. *USA*, v. 1, p. 485, 2007. Citado na página 52.
- ZHU, N. et al. Design of a treatment chamber for low-voltage pulsed electric field sterilization. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*, Elsevier, v. 42, p. 180–189, 2017. Citado na página 21.
- ZHU, X.; GUO, W.; WU, X. Frequency-and temperature-dependent dielectric properties of fruit juices associated with pasteurization by dielectric heating. *Journal of Food Engineering*, Elsevier, v. 109, n. 2, p. 258–266, 2012. Citado na página 52.
- ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. Z. *The finite element method: its basis and fundamentals*. [S.l.]: Elsevier, 2005. Citado na página 30.
- ZITZLER, E.; THIELE, L. Multiobjective evolutionary algorithms: a comparative case study and the strength pareto approach. *IEEE transactions on Evolutionary Computation*, IEEE, v. 3, n. 4, p. 257–271, 1999. Citado na página 36.

A Publicações

A.1 Periódico

Araujo, E., Lopes, I., Ramirez, J., "A computational modelling approach for the optimization of a pulsed electric field (PEF) system for liquid foods", IET Science, Measurement and Technology, v. 13, n. 3, p. 337-345, 2019.

A.2 Conferências

Araujo, E., Lopes, I., "Aplicação de Técnicas de Otimização Multiobjetivo em um Problema de Tratamento de Líquidos por Aplicação de Pulsos de Alta Tensão", III International Workshop on Advanced Dielectrics and Applications, Campina Grande, 2019;

Araujo, E., Lopes, I., Ramirez, J., "Comparison of electrodes arrangements of a high voltage pulsed electric field system for liquid sterilization using fem coupled with multi-objective optimization", Proc. 20th Int. Symp. on High Voltage Engineering (ISH), Buenos Aires, Argentina, pp. 1–6 (Paper ID:199), 2017.

B Código Fonte do Algoritmo de Elementos Finitos

```
{main}
```

```
function [Dens_energia, Media_Shn, Emax] = mef(Fonte, nrpulso)
```

```
%Dados Gerais da Malha
```

```
N=1297;
```

```
nel=6034;
```

```
Ncont=2159;
```

```
nnel=4;
```

```
%Parametros da fonte de alta tensao
```

```
durpulso=10e-6;
```

```
temptrat=durpulso*nrpulso;
```

```
%Parametros do Modelo de \textit{Hulsheger} para a bacteria \textit{E. co
```

```
t0=9e-6;
```

```
Ec1=4e3;
```

```
a1=5.8e3;
```

```
%Condutividade do liquido (generico)
```

```
cond=2e-3;
```

```
%Coordenadas nos para plotagem do potencial
```

```
xpot=[];
```

```
ypot=[];
```

```
zpot=[];
```

```
%Volumes dos tetraedros
```

```
Vi=[];
```

```
Volc=0;
```

```
%Arquivos da malha
```

```
load contor6.txt;
load conec6.txt;
for i=1:nel
    nodes(i,1)=conec6(i,2);
    nodes(i,2)=conec6(i,3);
    nodes(i,3)=conec6(i,4);
    nodes(i,4)=conec6(i,5);
end

load coord6.txt;
for i=1:N
    gcoord(i,1)=(coord6(i,1))*1e-1;
    gcoord(i,2)=(coord6(i,2))*1e-1;
    gcoord(i,3)=(coord6(i,3))*1e-1;
end

%Condicoes de contorno
bcdof=[];
bcval=[];
count=0;
count1=0;
for i=1:Ncont
    if contor6(i,1)==1;
        for k=2:4
            s=length(bcdof);
            for v=1:s
                if bcdof(v)==contor6(i,k);
                    count1=count+1;
                end
            end
            if count1==0
                bcdof_=contor6(i,k);
                bcdof=[bcdof bcdof_];
                bcval_=Fonte;
                bcval=[bcval bcval_];
            end
            count1=0;
        end
    end
end
```

```

if contor6(i,1)==2
    for k=2:4
        s=length(bcdof);
        for v=1:s
            if bcdof(v)==contor6(i,k);
                count1=count+1;
            end
        end
        if count1==0;
            bcdof_=contor6(i,k);
            bcdof=[bcdof bcdof_];
            bcval_=0;
            bcval=[bcval bcval_];
            end
            count1=0;
        end
    end
end
clc
fprintf('Inserting Dirichlet condiction: %1.0f %%\n',100*i/Ncont)
drawnow
end

%Montagem da matriz de elementos e matriz global
count=length(bcdof);
ff=zeros(N,1);
kk=zeros(N,N);
f=zeros(4,1);
for iel=1:nel
    nd(1)=nodes(iel,1);
    nd(2)=nodes(iel,2);
    nd(3)=nodes(iel,3);
    nd(4)=nodes(iel,4);
    x1=gcoord(nd(1),1);y1=gcoord(nd(1),2);z1=gcoord(nd(1),3);
    x2=gcoord(nd(2),1);y2=gcoord(nd(2),2);z2=gcoord(nd(2),3);
    x3=gcoord(nd(3),1);y3=gcoord(nd(3),2);z3=gcoord(nd(3),3);
    x4=gcoord(nd(4),1);y4=gcoord(nd(4),2);z4=gcoord(nd(4),3);
    if conec6(iel,1)==3
        [kel]=matriz_elementos(x1,y1,z1,x2,y2,z2,x3,y3,z3,x4,y4,z4,cond);
    end
end

```

```

        if conec6(iel,1)==2
            [kel]=matriz_elementos(x1,y1,z1,x2,y2,z2,x3,y3,z3,x4,y4,z4,cond
*1000);
            end
            [kk]=matriz_global(kk, kel ,nd);
            clc
            fprintf('Building matriz: %1.0f %%\n',100*iel/nel)
            drawnow
        end
        [kk,ff]=Dirichlet(kk,ff,bcdof,bcval,count,N);
        fsol=kk\ff;

    for i=1:N
        xpot(i)=gcoord(i,1);ypot(i)=gcoord(i,2);zpot(i)=gcoord(i,3);
    end

%Calculo do campo eletrico
xb=[];
yb=[];
zb=[];
Ex=[];
Ey=[];
Ez=[];
Emod=[];
xl=[];
yl=[];
zl=[];
Exl=[];
Eyl=[];
Ezl=[];
Eliq=[];
Sp=[];
Sl=[];
Volumes=[];
Energiatot=0;
Vl=0;
for iel=1:nel
    nd(1)=nodes(iel,1);
    nd(2)=nodes(iel,2);

```

```

nd(3)=nodes( iel ,3);
nd(4)=nodes( iel ,4);
x1=gcoord(nd(1) ,1);y1=gcoord(nd(1) ,2);z1=gcoord(nd(1) ,3);
x2=gcoord(nd(2) ,1);y2=gcoord(nd(2) ,2);z2=gcoord(nd(2) ,3);
x3=gcoord(nd(3) ,1);y3=gcoord(nd(3) ,2);z3=gcoord(nd(3) ,3);
x4=gcoord(nd(4) ,1);y4=gcoord(nd(4) ,2);z4=gcoord(nd(4) ,3);
[E]=campeletrico( fsol ,nd,x1,y1,z1,x2,y2,z2,x3,y3,z3,x4,y4,z4 );
xb( iel)=(x1+x2+x3+x4)/4;
yb( iel)=(y1+y2+y3+y4)/4;
zb( iel)=(z1+z2+z3+z4)/4;
Ex( iel)=E(1);
Ey( iel)=E(2);
Ez( iel)=E(3);
Emod( iel)=(sqrt((Ex( iel)^2)+(Ey( iel)^2)+(Ez( iel)^2)));
A=[x2 y2 z2;x3 y3 z3;x4 y4 z4];
B=[1 y2 z2;1 y3 z3;1 y4 z4];
C=[1 x2 z2;1 x3 z3;1 x4 z4];
D=[1 x2 y2;1 x3 y3;1 x4 y4];
V=abs((1/6)*(det(A)-(x1*det(B))+(y1*det(C))-(z1*det(D))));
Volc=Volc+V;
Vi=[Vi V];
clc

%Calculo da inativacao microbiana e energia em cada elemento da malha
if conec6( iel ,1)==3&&(Emod( iel )>0)
    xl=[xl xb( iel )];
    yl=[yl yb( iel )];
    zl=[zl zb( iel )];
    Exl=[Exl Ex( iel )];
    Eyl=[Eyl Ey( iel )];
    Ezl=[Ezl Ez( iel )];
    Eliq=[Eliq Emod( iel )];
    Energia=(cond*(Emod( iel )^2)*V*tempratr)*(1/3600);
    Energiatot=Energiatot+Energia;
    S_=(100*(tempratr/t0)^(-(Emod( iel )-Ec1)/a1));
    if S_>100
        S_=100;
    end
    S_=S_*V;

```

```

        Sl=[Sl S_];
        Sp=[Sp S_];
        Vl=Vl+V;
        Volumes=[Volumes V];
    end
    clc
    fprintf('Calculating electrical field: %1.0f %%\n',100*iel/nel)
    drawnow
end

%Densidade de energia (Wh/L)
Dens_energia=EnergiaTot/(Vl*1e-3) ;

%Media da inativacao microbiana
Media_Shn=sum(Sp)/Vl;

%Campo eletrico maximo
Emax=max(Eliq)

%Graficos

%Figure
plot(xl,Eliq/1e3,'b.')
title('Distribuicao de Campo Eletrico em Relacao ao Eixo x
- Geometria Coaxial','fontsize', 22);
xlabel('x(cm)','fontsize', 20);
ylabel('E(kV/cm)','fontsize', 20)
grid
saveas(gcf,'Eliquido_x','jpg');
%Figure

plot(zl,Eliq/1e3,'b.')
title('Distribuicao de Campo Eletrico em Relacao ao Eixo y
- Geometria Coaxial','fontsize', 22);
xlabel('y(cm)','fontsize', 20);
ylabel('E(kV/cm)','fontsize', 20);
grid
saveas(gcf,'Eliquido_y','jpg');
%Figure

```

```

plot(yl,Eliq/1e3,'b.')
title('Distribuicao de Campo Eletrico em Relacao ao Eixo z
- Geometria Coaxial','fontsize',22);
xlabel('z(cm)','fontsize',20)
ylabel('E(kV/cm)','fontsize',20)
grid

saveas(gcf,'Eliquido_z','jpg');
%Figure

for i=1:size(Eliq,2)
    Kplot(i)=10;
end
scatter3(xl,zl,yl,Kplot,Eliq/1e3,'filled')
grid
title('Distribuicao de Campo Eletrico em Relacao 3D
- Geometria Coaxial','FontSize',22);
xlabel('x(cm)','fontsize',20)
ylabel('y(cm)','fontsize',20)
zlabel('z(cm)','fontsize',20)
colorbar
%saveas(gcf,'Distribuicao 3D','jpg');

{Funcao Campo eletrico}

function [E]=campoeletrico(fsol,nd,x1,y1,z1,x2,y2,z2,x3,y3,z3,x4,y4,z4)
D=[fsol(nd(1));fsol(nd(2));fsol(nd(3));fsol(nd(4))];
J=[(x2-x1) (x3-x1) (x4-x1);(y2-y1) (y3-y1) (y4-y1);(z2-z1) (z3-z1)
(z4-z1)];
gradNi=[-1 1 0 0;-1 0 1 0;-1 0 0 1];
B=((inv(J))')*(gradNi);
E=(-1)*B*D;

{Funcao Dirichlet}

function [kk,ff]=Dirichlet(kk,ff,bcdof,bcval,count,N)
ng=count;
for ic=1:ng

```

```

    id=bcdof(ic);
    val=bcval(ic);
    for i=1:N
        ff(i)=ff(i)-val*kk(i,id);
        kk(id,i)=0;
        kk(i,id)=0;
    end
    kk(id,id)=1;
    ff(id)=val;
end

{Funcao matriz elementos}
function [kel]=matriz_elementos(x1,y1,z1,x2,y2,z2,x3,y3,z3,x4,y4,z4,er)
f=zeros(4,1);
kel=zeros(4,4);
J=[(x2-x1) (x3-x1) (x4-x1);(y2-y1) (y3-y1) (y4-y1);(z2-z1) (z3-z1)
(z4-z1)];
gradNi=[-1 1 0 0;-1 0 1 0;-1 0 0 1];
B=((inv(J))')*(gradNi);
kel=er*(B')*B*(det(J))*(1/6);

{Funcao matriz global}
function [kk]=matriz_global(kk,kel,nd)
nnel=4;
for i=1:nnel
    ii=nd(i);
    for j=1:nnel
        jj=nd(j);
        kk(ii,jj)=kk(ii,jj)+kel(i,j);
    end
end
end

```

C Resultados do Planejamento Experimental

- Sistemas Estáticos

C.1 Matrizes de Planejamento Experimental

$r(\text{mm})$	$V(\text{kV})$	$t(\mu\text{s})$	$\bar{S}$	$Q_s(\text{kJ/kg})$	$E_{max}(\text{kV/cm})$
2.2	9.6	50	0.74	3.6	17.2
2.2	9.6	5050	0.58	35.3	17.2
2.2	9.6	10050	0.57	703.1	17.2
2.2	16.8	50	0.43	10.7	30.2
2.2	16.8	5050	0.21	108.2	30.2
2.2	16.8	10050	0.20	2152.8	30.2
2.2	24	50	0.25	21.96	43.1
2.2	24	5050	9.4×10^{-2}	2207.9	43.1
2.2	24	10050	9.0×10^{-2}	4393.8	43.1
2.6	9.6	50	0.72	4.0	18.0
2.6	9.6	5050	0.57	40.0	18.0
2.6	9.6	10050	0.55	801.4	18.0
2.6	16.8	50	0.41	12.2	31.5
2.6	16.8	5050	0.20	1232.3	31.5
2.6	16.8	10050	0.19	2453.8	31.5
2.6	24	50	0.24	24.9	162.4
2.6	24	5050	0.10	251.6	45.1
2.6	24	10050	9.9×10^{-2}	5007.6	45.1
3.0	9.6	50	0.69	4.6	19.3
3.0	9.6	5050	0.54	466.2	19.3
3.0	9.6	10050	0.53	927.4	19.3
3.0	16.8	50	0.39	14.0	33.8
3.0	16.8	5050	0.20	1427.4	33.8
3.0	16.8	10050	0.19	2873.2	33.8
3.0	24	50	0.24	28.8	48.4
3.0	24	5050	0.12	291.2	48.4
3.0	24	10050	0.11	5797.1	48.4

Tabela C.1 – Matriz de planejamento experimental e resultados para geometria de eletrodos cilíndricos tipo "agulha"

C.2 Modelos de Regressão

C.2.1 Equações do modelo de Regressão para Geometria de Eletrodos Cilíndricos

$$\begin{aligned}
 I_r(V, t, r) = & 1,969 - 1,180 \cdot 10^{-4}V - 5,898 \cdot 10^{-5}t - 2.104 \cdot 10^{-1}r + 1,545 \cdot 10^{-10}Vt \\
 & + 5,308 \cdot 10^{-6}Vr + 2,462 \cdot 10^{-6}tr + 2,122 \cdot 10^{-9}V^2 + 3,206 \cdot 10^{-9}t^2 + 1,732 \cdot 10^{-2}r^2
 \end{aligned}
 \tag{C.1}$$

$r_i(\text{mm})$	$V(\text{kV})$	$t(\mu\text{s})$	$\bar{S}$	$Q_s(\text{kJ/kg})$	$E_{\text{max}}(\text{kV/cm})$
4	3.2	50	0.88	1.8	20.0
4	3.2	5050	0.79	185.8	20.0
4	3.2	10050	0.78	369.7	20.0
4	5.6	50	0.56	5.8	35.1
4	5.6	5050	0.26	568.8	35.1
4	5.6	10050	0.24	1131.8	35.1
4	8	50	0.30	11.5	50.0
4	8	5050	0.06	1160.6	50.0
4	8	10050	0.06	2309.8	50.0
6	3.2	50	0.63	3.6	15.9
6	3.2	5050	0.26	367.6	15.9
6	3.2	10050	0.23	731.5	15.9
6	5.6	50	0.20	11.2	27.8
6	5.6	5050	7×10^{-3}	1125.7	27.8
6	5.6	10050	5×10^{-3}	2240.6	27.8
6	8	50	0.65	22.7	39.7
6	8	5050	3×10^{-4}	2297.5	39.7
6	8	10050	2×10^{-4}	4572.4	39.7
8	3.2	50	0.28	7.6	13.8
8	3.2	5050	2×10^{-2}	744.1	13.8
8	3.2	10050	1.5×10^{-2}	1480.3	13.8
8	5.6	50	4.9×10^{-2}	14.8	24.1
8	5.6	5050	4×10^{-4}	2276.3	24.1
8	5.6	10050	3×10^{-4}	4529.9	24.1
8	8	50	9×10^{-3}	45.7	34.4
8	8	5050	1.5×10^{-5}	4496.0	34.4
8	8	10050	8×10^{-6}	9205.9	34.4

Tabela C.2 – Matriz de planejamento experimental e resultados para geometria coaxial

$$Q_{sr}(V, t, r) = 1,208.10^3 - 7,838.10^{-2}V - 1,295.10^{-1}t - 4,588.10^2r + 8,168.10^{-6}Vt + 1,428.10^{-2}Vr + 2,666.10^{-2}tr + 1,227.10^{-6}V^2 - 1,2409.10^{-13}t^2 + 42,09r^2 \quad (\text{C.2})$$

C.2.2 Equações do modelo de Regressão para Geometria Coaxial

$$I_r(V, t, r_i) = 3,708 - 4,627.10^{-4}V - 8,792.10^{-5}t - 53,046.10^{-1}r_i + 3,117.10^{-9}Vt + 2,988.10^{-5}Vr_i + 2,939.10^{-6}tr_i + 1,687.10^{-8}V^2 + 3,398.10^{-9}t^2 + 2,078.10^{-2}r_i^2 \quad (\text{C.3})$$

$$Q_{sr}(V, t, r_i) = 8,9827.10^3 - 1,375V - 7,962.10^{-1}t - 1,837610^3r_i + 9,3323.10^{-5}Vt + 1,5138.10^{-1}Vr_i + 9,4577.10^{-2}tr_i - 1,4109.10^{-12}V^2 - 1,4109.10^{-12}t^2 + 82,48r_i^2 \quad (\text{C.4})$$

$d(\text{mm})$	$V(\text{kV})$	$t(\mu\text{s})$	$\bar{S}$	$Q_s(\text{kJ/kg})$	$E_{\text{max}}(\text{kV/cm})$
8	8	50	0.69	3.6	19.9
8	8	5050	0.58	359.3	19.9
8	8	10050	0.57	715.3	19.9
8	14	50	0.54	10.8	34.8
8	14	5050	0.48	1110.5	34.8
8	14	10050	0.47	2190.6	34.8
8	20	50	0.48	22.3	49.7
8	20	5050	0.44	224.6	49.7
8	20	10050	0.44	4470.8	49.7
12	8	50	0.76	2.2	12.8
12	8	5050	0.52	223.9	12.8
12	8	10050	0.50	445.3	12.8
12	14	50	0.46	6.8	22.5
12	14	5050	0.33	685.4	22.5
12	14	10050	0.36	1364.0	22.5
12	20	50	0.32	13.7	3.8
12	20	5050	0.29	1398.9	32.1
12	20	10050	0.30	2784.2	32.1
16	8	50	0.93	1.4	10.1
16	8	5050	0.80	149.4	10.1
16	8	10050	0.79	297.4	10.1
16	14	50	0.49	4.7	17.7
16	14	5050	0.21	457.6	17.7
16	14	10050	0.20	910.1	17.7
16	20	50	0.30	9.4	25.2
16	20	5050	0.16	933.5	25.2
16	20	10050	0.16	1857.6	25.2

Tabela C.3 – Matriz de planejamento experimental e resultados para geometria de eletrodos planos paralelos

C.2.3 Equações do modelo de Regressão para Geometria de Eletrodos Planos Paralelos

$$I_r(V, t, d_e) = 1,9693 - 1,1804 \cdot 10^{-4}V - 5,8981 \cdot 10^{-5}t - 2,1038 \cdot 10^{-1}d_e - 1,5456 \cdot 10^{-10}Vt - 5,3081 \cdot 10^{-6}Vd_e + 2,4627 \cdot 10^{-6}td_e + 2,1225 \cdot 10^{-9}V^2 + 3,20168 \cdot 10^{-9}t^2 + 1,7323 \cdot 10^{-2}d_e^2 \quad (\text{C.5})$$

$$Q_{sr}(V, t, d_e) = 1,2081 \cdot 10^3 - 7,8387 \cdot 10^{-2}V - 1,2955 \cdot 10^{-1}t - -4,588 \cdot 10^2d_e + 8,1682 \cdot 10^{-6}Vt + 1,4283 \cdot 10^{-2}Vd_e + 2,6668 \cdot 10^{-2}td_e + 1,2277 \cdot 10^{-6}V^2 + 1,2409 \cdot 10^{-13}t^2 + 42,10d_e^2 \quad (\text{C.6})$$