



Estudo da Tensão de Cisalhamento em Hidrociclones para Separação de Células Animais

Rafael Bertges Silva de Carvalho

Projeto Final de Curso

Orientador:

Prof. Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Setembro de 2007

Estudo da Tensão de Cisalhamento em Hidrociclones para Separação de Células Animais

Rafael Bertges Silva de Carvalho

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química,
como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro
Químico.

Aprovado por:

Prof. Caetano Moraes, Ph.D.

Prof. Leda do Reis Castilho, Dr. – Ing.

Eng. Romi Lamb Machado, M.Sc.

Orientado por:

Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Setembro de 2007

Carvalho, Rafael Bertges Silva de.

Estudo da Tensão de Cisalhamento em Hidrociclones para Separação de Células Animais / Rafael Bertges Silva de Carvalho. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2007.

xi, 60 p.; il.

(Projeto Final de Curso) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2007.

Orientador: Ricardo de Andrade Medronho.

1. Hidrociclones. 2. CFD. 3. Células Animais. 4. Tensão de Cisalhamento. 5. Viabilidade Celular. 6. (Projeto Final de Curso). (Graduação – UFRJ/EQ). 7. Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Dedico este trabalho a todos que me ajudaram durante a vida acadêmica:
Carla e Francisco, meus pais, Alzira e Geraldo, meus outros pais. Carol e Bia,
minhas amadas irmãs, Fernanda, minha namorada e companheira e todos os
meus grandes amigos.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao professor e amigo Ricardo Medronho pela oportunidade a mim concedida de compartilhar de seus conhecimentos. Obrigado por todo o apoio e paciência.

Agradeço a todos os amigos de faculdade que me acompanharam nesta jornada incrível. Em especial, agradeço ao Fabio Pereira (Macuna), por tudo o que me ensinou. Pelo exemplo de paixão pelo que faz. E por me mostrar na prática que realmente existem pessoas que não precisam passar pelo B e pelo C para chegarem ao D. Ao Igor Malamace pela grande amizade e exemplo de confiança em si mesmo. Vocês hoje são mais que amigos.

Agradeço a minha namorada Fernanda Lechuga (Anjo!). Você foi o bem mais valioso que esta jornada me trouxe. OBRIGADO!

Agradeço aos meus grandes irmãos Bruno, Paulo Gabriel e Douglas. O tempo passa as coisas mudam e minha admiração e amizade por vocês só aumenta.

Finalmente, agradeço aqueles que fazem minha vida ter sentido. Aqueles que sempre estarão do meu lado e que eu sempre estarei ao lado deles também. Minha família. Meus pais. Minhas irmãs. Meus tios. Meus primos. Amo todos vocês!

Resumo do Projeto Final apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Estudo da Minimização das Tensões de Cisalhamento em Hidrociclones para Separação de Células Animais

Rafael Bertges Silva de Carvalho

Setembro de 2007

Orientador: Prof. Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

Os equipamentos de retenção celular usados em processos contínuos com reciclo celular (perfusão) devem apresentar certas características como operação por longos períodos de tempo, sem necessidade de manutenção do equipamento ou interrupção do processo, ser esterilizável e reutilizável e ainda, não devem afetar a viabilidade da cultura, a produtividade ou a qualidade do produto. Além disto, estes dispositivos devem apresentar alta eficiência de separação de células viáveis, independentemente da concentração celular na alimentação.

Hidrociclones não apresentam partes móveis e, caso fossem empregados em processos em perfusão, não necessitariam de manutenção, o que evitaria riscos de contaminação e permitiria a operação contínua do biorreator por vários meses. Eles parecem ser, portanto, perfeitamente adequados ao uso em procedimentos estéreis, como os requeridos na indústria biotecnológica. Além disso, possuem alta capacidade e eficiência e sua simplicidade confere facilidade de operação e de previsão de performance. Desta forma, eles se apresentam como uma boa opção de dispositivo de retenção celular.

A fluidodinâmica computacional (CFD) é uma ferramenta poderosa que permite investigar o escoamento de fluidos dentro de equipamentos empregados em processos, viabilizando o estudo de otimização, sem as desvantagens de custo e tempo relacionadas à realização de experimentos laboratoriais. Neste contexto, o presente trabalho utilizou o pacote comercial de fluidodinâmica computacional CFX 11.0, para promover um estudo de otimização da geometria de um hidrociclone, visando minimizar as tensões de cisalhamento no interior do equipamento, de forma a permitir seu uso na separação de células animais sem perda de viabilidade celular.

Abstract of the Final Project presented to Escola de Química/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Chemical Engineer.

REDUCTION STUDY OF THE TENSION OF SHEAR IN HIDROCYCLONES FOR SEPARATION OF ANIMAL CELLS

Rafael Bertges Silva de Carvalho

2007, September

Supervisor: Prof. Ricardo de Andrade Medronho, Ph.D.

The equipments of cellular retention used in continuous processes with a recycle cellular (perfusion) must present some characteristics as operation for long periods of time, without necessity of equipment maintenance or interruption of the process, be barren and re-useful, and finally, do not affect the viability of the culture, the productivity or the product quality. Moreover, these devices must have high efficiency of separation of viable cells, independently of the cellular concentration in the feeding.

Hidroclones does not present mobile parts and if they were used in processes of perfusion, it would not need maintenance. Because of that it would prevent contamination risks and it would allow the continuous operation of the bioreactor for many months. They seem to be, therefore, perfectly adjusted to the use in barren procedures, as required in the biotechnological industry. Moreover, they possess high capacity and efficiency and its simplicity confers easiness of operation and forecast the performance. So they are a good option of cellular retention device.

The computational fluid dynamics (CFD) is a powerful tool that allows to investigate the fluid draining inside the equipment used in processes, making

possible the optimization study without the disadvantages of related cost and time to the accomplishment of laboratories experiments. In this context, the present work used the commercial package of computational fluid dynamics CFX 11.0, to promote a study of optimization of the hidrocyclone geometry, aiming to minimize the tensions of shear inside the equipment and allow its use in the separation of animal cells without loss of cellular viability.

ÍNDICE

1.	INTRODUÇÃO.....	1
1.1.	Motivação.....	1
1.2.	Objetivo.....	2
1.3.	Organização.....	2
2.	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	4
2.1.	Dispositivos de retenção celular.....	4
2.2.	Hidrociclones.....	8
2.3.	Fluidodinâmica Computacional (CFD).....	10
2.3.1.	Método dos Volumes Finitos.....	11
2.3.2.	Esquemas de Interpolação.....	13
2.3.3.	Esquemas de diferenças centrais (CDS).....	13
2.3.4.	Esquema Upwind.....	13
2.3.5.	Difusão Numérica.....	13
2.3.6.	Etapas de uma simulação fluidodinâmica.....	14
2.3.7.	Gerador de Geometria.....	15
2.3.8.	Gerador de Malha.....	15
2.3.9.	Pré-Processamento.....	16
2.3.10.	Solvers.....	16
3.	MODELAGEM MATEMÁTICA.....	19
3.1.	Conservação.....	19
3.2.	Modelagem Monofásica.....	19
3.3.	Turbulência.....	19
3.3.1.	Equações da turbulência.....	27
3.3.2.	Equações Médias de Reynolds.....	28
3.3.3.	O Conceito de Viscosidade Turbulenta.....	30
3.3.4.	O Modelo $k-\epsilon$	31
3.3.5.	Modelo dos Tensores de Reynolds.....	31
3.4.	Modelo para a Região Próxima à Parede.....	34
4.	SIMULAÇÕES.....	35
4.1.	Geração da Geometria.....	36
4.2.	Geração e Seleção das Malhas.....	39
4.3.	Pré-processamento.....	43

4.3.1.	Modelagem Monofásica	44
4.3.2.	Condições de contorno	44
4.3.3.	Parâmetros para simulação transiente	45
4.4.	Parâmetros de Solução (Solver).....	45
4.5.	Pós-processamento	46
5.	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	47
5.1.	Caracterização do escoamento	47
6.	CONCLUSÕES.....	56
6.1.	Sugestões para trabalhos futuros	56
7.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	58

Índice de Figuras

Figura 1.1 - Foto do hidrociclone utilizado como base para o presente trabalho	2
Figura 2.1– Perfil qualitativo de velocidades tangenciais típico de um hidrociclone (Svarovsky, 2000).....	9
Figura 2.2– Vista em perspectiva de um hidrociclone e seu padrão de fluxo interno (PINTO et al. 2007).....	10
Figura 2.3– Representação de um volume de controle finito genérico em uma configuração bidimensional (BARREIRA et al., 2003).	12
Figura 3.1– Tipos de informações obtidas em um escoamento turbulento (NETO, A. S., LTCM-UFU).	23
Figura 3.2– Estruturas turbulentas (NETO, A. S., LTCM-UFU).	24
Figura 3.3– Gráfico do espectro de energia cinética versus número de onda. Quanto maior o número de onda, menor o comprimento do turbilhão (NETO, A. S., LTCM-UFU).	26
Figura 4.1 – Geometrias utilizadas para simulação. Geometria 1 (a), Geometria 2 (b) e Geometria 3 (c).....	36
Figura 4.2 – Parte superior das geometrias utilizadas para simulação. Geometria 1 (a), Geometria 2 (b) e Geometria 3 (c).	37
Figura 4.3 – Desenho técnico de um hidrociclone genérico.	38
Figura 4.4 – Gráfico ilustrativo de um estudo de malhas. O ponto em destaque exibe a malha que fornece a maior precisão, com o menor esforço computacional possível.	40
Figura 4.5 – Gráfico de velocidade tangencial versus raio do hidrociclone. A variação do perfil de velocidades tangenciais ilustra a influência da malha no resultado da simulação.	41
Figura 4.6 – Malha superficial da Geometria 1.	42
Figura 4.7 – Malha superficial da Geometria 2.	42
Figura 4.8 – Malha superficial da Geometria 3.	43
Figura 4.9 – Corte da malha volumétrica. Geometria 1 (a), Geometria 2 (b) e Geometria 3 (c).	43
Figura 5.1 – Ilustração das linhas-base para coleta de dados de velocidade tangencial.	47
Figura 5.2 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cilíndrica da Geometria 1.....	48
Figura 5.3 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cônica da Geometria 1.	48
Figura 5.4 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cilíndrica da Geometria 2.....	49
Figura 5.5 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cônica da Geometria 2.	49
Figura 5.6 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cilíndrica da Geometria 3 utilizando modelo de turbulência k- ϵ	50

Figura 5.7 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cilíndrica da Geometria 3 utilizando modelo de turbulência SSG.	50
Figura 5.8 –Perfil de velocidades axiais obtido pelas simulações das geometrias estudadas. .	52
Figura 5.9 – Perfil de velocidades tangenciais ao longo de um plano longitudinal às geometrias para: (a) Geometria 1, (b) Geometria 2 e (c) Geometria 3.....	53
– Figura 5.10Perfil de tensão cisalhante sobre as paredes dos hidrociclone para (a) Geometria 1, (b) Geometria 2 e (c) Geometria 3.	54
Figura 5.11 – Perfil ampliado de tensão cisalhante sobre as paredes dos hidrociclone para (a) Geometria 1, (b) Geometria 2 e (c) Geometria 3.	54

Índice de Tabelas

Tabela 2.1– Dispositivos de separação celular e os princípios pelos quais funcionam (PINTO, 2007).....	5
Tabela 4.1 – Dimensões dos hidrociclones simulados – unidades em mm.	38
Tabela 5.1 – Tempos de residência de cada geometria simulada.	51

1. INTRODUÇÃO

1.1. Motivação

Nos últimos anos, devido aos progressos na área da biotecnologia, observa-se um aumento significativo no número de biofármacos recombinantes e na demanda pelos mesmos. Este evento leva à necessidade de aumento da capacidade produtiva através da construção de novas e maiores plantas. Isto demanda grandes investimentos e aumento da produtividade dos processos, obtendo mais produtos em uma mesma escala de produção.

O cultivo em escala comercial pode ser conduzido utilizando diferentes tecnologias: garrafas rotatórias, microcarregadores, biorreatores de cultivo em suspensão e de fibras ocas. Entretanto, tratando-se de produtos que necessitam ser produzidos em grande quantidade, o cultivo em suspensão é em geral o mais efetivo. São sistemas que apresentam concentração homogênea de células, nutrientes, metabólitos e produto, facilitando o monitoramento e controle da cultura. Outro fator importante é o modo de operação de processos de cultivo celular. Nos sistemas em batelada e batelada alimentada, as células estão sujeitas às condições ambientais que variam ao longo do tempo, enquanto que em processos contínuos (simples ou em perfusão) pode-se operar sob condições estáveis (estado estacionário).

Os processos de cultivo contínuo com reciclo celular, conhecidos como processos em perfusão, apresentam diversas vantagens sobre processos em batelada e batelada alimentada, devido à sua capacidade de fornecer altas concentrações celulares, à possibilidade de operação em estado estacionário, ao maior controle sobre a fisiologia celular e aos altos índices de produtividade obtidos. Entretanto, devido ao alto conteúdo de proteínas na maioria das culturas celulares, ao reduzido tamanho e densidade e à elevada sensibilidade das células animais, dificuldades relacionadas ao equipamento de retenção celular costumam limitar a duração dos processos em perfusão.

Diferentes tipos de equipamentos têm sido utilizados para reter as células no interior de biorreatores operando em perfusão, no entanto, devido a problemas diversos, a aplicabilidade destes dispositivos fica comprometida.

1.2. Objetivo

O presente trabalho visa estudar as tensões de cisalhamento no interior de um equipamento de retenção celular do tipo hidrociclone através da utilização do pacote comercial de fluidodinâmica computacional ANSYS CFX 11.0. Este estudo tem como objetivo prático permitir o uso de hidrociclones, que são equipamentos de alta eficiência, na separação de células animais sem perda de viabilidade celular. Tomou-se por base um hidrociclone já existente (Figura 1.1) e com resultados de eficiência reconhecidamente satisfatórios. Esta geometria e mais outras duas modificadas a partir da primeira foram utilizadas neste trabalho.



Figura 1.1 - Foto do hidrociclone utilizado como base para o presente trabalho

1.3. Organização

O presente texto se divide em seis capítulos. Este primeiro mostrou a motivação e os objetivos do estudo apresentado.

O segundo capítulo apresenta, de maneira resumida, os processos de separação celular existentes e situa o leitor quanto à posição dos hidrociclones neste cenário. Ainda coloca em evidência a forma como a fluidodinâmica computacional (CFD) pode contribuir para o estudo.

No terceiro capítulo, intitulado Modelagem Matemática, são apresentados os modelos matemáticos utilizados pelo software para a

representação da fluidodinâmica, baseados nas equações de conservação de massa e momento, além de equações constitutivas.

O quarto capítulo, Simulações, descreve os procedimentos adotados durante as simulações.

E finalmente, os capítulos quinto e sexto apresentam, respectivamente, os resultados e as conclusões do trabalho.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. Dispositivos de retenção celular

Os dispositivos de retenção celular utilizados em processos em perfusão devem apresentar características necessárias à sua adequada operação. A separação celular deve ser realizada por um longo período de tempo, sem necessidade de manutenção do equipamento ou interrupção do processo. A esterilização e reutilização do dispositivo também são fatores primordiais. Principalmente, o equipamento não pode afetar a viabilidade da cultura, a produtividade ou a qualidade do produto, e deve ainda apresentar alta eficiência de separação de células viáveis, independentemente da concentração celular na alimentação. Idealmente, o dispositivo de separação deve diferenciar as células viáveis das não-viáveis, permitindo a retirada destas últimas do sistema de cultivo (WOODSIDE *et al.*, 1998; CASTILHO e MEDRONHO, 2007).

O princípio de separação da maioria dos dispositivos atuais de retenção celular baseia-se no tamanho e na densidade da partícula, conforme pode ser observado na tabela 2.1, e consiste de adaptações dos métodos tradicionais de separação sólido-líquido.

Tabela 2.1– Dispositivos de separação celular e os princípios pelos quais funcionam (PINTO, 2007).

Dispositivo de Retenção Celular	Princípio da retenção		
	Tamanho	Densidade	Compressibilidade
Filtros Tangenciais	X	-	-
<i>Spin-Filters</i>	X	X	-
Sedimentadores	X	X	-
Centrífugas	X	X	-
Hidrociclones	X	X	-
Separação Ultrassônica	X	X	X

Freqüentemente as limitações dos dispositivos de retenção celular impõem restrições à duração dos processos em perfusão. O alto conteúdo de proteínas na maioria dos meios de cultivo, e o reduzido tamanho celular, fazem com que os dispositivos convencionais de retenção tendam a colmatar, ou obstruir, interrompendo o processo (KRETZMER, 2002).

Diferentes tipos de equipamentos têm sido utilizados para reter as células no interior de biorreatores industriais operando em perfusão. Esses aparatos se baseiam principalmente na sedimentação em campo de força centrífugo ou gravitacional (centrífugas e sedimentadores) e na filtração (CASTILHO e MEDRONHO, 2002).

Na filtração, o grande problema é colmatação progressiva do meio filtrante (KAWAHARA *et al.*, 1994). Na sedimentação gravitacional, pode ocorrer adesão celular nas paredes do sedimentador, além de ser necessário

um grande tempo de residência das células no interior do equipamento, o que compromete a viabilidade (BATT *et al.*, 1990). Na centrifugação pode ocorrer adesão celular, com o conseqüente bloqueio dos canais das centrífugas contínuas (JÄGER, 1992).

Os dispositivos que se baseiam no processo de filtração, estão divididos em módulos de filtração tangencial, filtração dinâmica e *spin-filters* (VAN REIS e SYDNEY, 2001; WOODSIDE *et al.*, 1998).

A filtração tangencial é empregada utilizando-se módulos de membranas planas e de fibras ocas. Neste sistema, a suspensão de alimentação escoia tangencialmente à membrana e perpendicularmente à direção do permeado. Entretanto, os níveis de tensões de cisalhamento aplicados, que são função da vazão aplicada, são limitados de acordo com a tolerância da célula, sob risco de ocorrer lise celular. Como um efeito em cascata, a lise celular e a conseqüente queda de viabilidade podem resultar em uma cultura com diâmetro celular médio reduzido e no acúmulo de “debris” celulares, ambos responsáveis pela diminuição do fluxo de filtrado pelos motivos já mencionados. Certas medidas como retrolavagem das membranas com o próprio permeado sendo alimentado em fluxo contrário e alimentação com fluxo pulsante, só prolongaram o tempo de operação dos módulos, apenas adiando a necessidade de troca ou paralisação dos processos devido à diminuição do fluxo permeado (MAIORELLA *et al.*, 1993; CASTILHO e MEDRONHO, 2002; WOODSIDE *et al.*, 1998; PINTO *et al.*, 2007).

A filtração dinâmica consiste na criação de um movimento relativo entre a membrana e um rotor, permitindo desacoplar os níveis de tensão de cisalhamento na superfície da membrana da vazão de alimentação, promovendo um ajuste fino por toda a superfície da membrana, gerando tensões cisalhantes independentes desta mesma vazão, a qual pode ser mantida baixa, ao contrário do que ocorre na filtração tangencial. Existem, basicamente, duas geometrias empregadas em filtração dinâmica: filtros de cilindro rotativo (*VFF – Vortex Flow Filter*) e filtros de disco rotativo (*RDF – Rotating Disk Filter*). Os módulos VFF com membranas apresentaram problemas de colmatação, e o aumento de duas vezes em sua superfície filtrante representou uma elevação de somente 50% do fluxo de filtrado,

dificultando a sua ampliação de escala (CASTILHO e MEDRONHO, 2002, VOISARD *et al.*, 2003).

Filtros de malha rotativa (*Spin-filters*) são dispositivos cilíndricos, compostos em sua maioria por uma tela, ou também por membranas, e localizados geralmente no interior do biorreator. No entanto, alguns trabalhos utilizam *spin-filters* acoplados externamente ao biorreator, denominando-os *spin-filters* externos, os quais são, basicamente, filtros de cilindro rotativo, como os discutidos anteriormente. Altas concentrações celulares e produtividades foram alcançadas desde os primeiros *spin-filters* utilizados em processo em perfusão com células animais. No entanto, os cultivos, em geral, não apresentam longa duração, devido ao entupimento da malha. Como na filtração tangencial, a colmatação é função da concentração celular e da taxa de perfusão, assim como do tamanho dos poros, do material da malha filtrante e da velocidade de rotação (CASTILHO e MEDRONHO, 2002).

A separação de células animais em sedimentadores e centrífugas tem como princípio a sedimentação da célula em um campo gravitacional ou centrífugo, respectivamente. Em ambos os sistemas, a velocidade terminal da partícula é o principal fator que irá influenciar na sedimentação. Em campos gravitacionais, as células animais apresentam uma velocidade terminal muito baixa (1-15 cm/h em meio a 37°C) devido à diferença entre sua densidade e do meio de cultivo ser muito pequena (aproximadamente 5% de diferença) e do seu diâmetro ser bastante reduzido. Isso implica em uma necessidade de uma área muito grande. Um dos fatores críticos relacionados a sedimentadores é a dificuldade de ampliação de escala, uma vez que sua área aumenta com o quadrado e o volume do biorreator com o cubo de uma dimensão característica. Dentre outros fatores que desestimulam a utilização de sedimentadores gravitacionais está a possibilidade de adesão das células às paredes do equipamento e o elevado tempo de residência das mesmas em condições potencialmente adversas (CASTILHO e MEDRONHO, 2002).

Nos sedimentadores centrífugos, um campo centrífugo é aplicado sobre as células com o intuito de se aumentar sua velocidade terminal. No entanto, a sensibilidade às condições de separação centrífuga é um fator de preocupação. Tempos máximos de operação relatados de processos em

perfusão usando centrífugas estão entre 12 e 40 dias. São tempos relativamente pequenos em comparação com outros dispositivos de retenção. Além disso, os principais problemas observados em centrífugas são os entupimentos dos dutos e acúmulo de células aderidas no interior dos dispositivos. Sua complexidade mecânica, especialmente dos selos mecânicos requeridos para manter esterilidade, faz das centrífugas equipamentos caros, o que aumenta o investimento inicial do processo de produção de biofármacos (TOKASHIKI *et al.*, 1990).

A separação ultrassônica se baseia na ação de forças acústicas sobre as células em suspensão em um campo de ondas estacionárias. Estas forças são proporcionais às diferenças de compressibilidade e densidade entre as células e o meio de cultivo. O campo ultrassônico retém e agrega as partículas, e os agregados sedimentam rapidamente com o desligamento periódico do equipamento, obtendo-se, então, altas eficiências de separação (95-100%) e altas concentrações celulares (10^7 células/mL). O alto grau de energia inserido no sistema pode gerar um aumento da temperatura (+1,3° C/min), representando um problema para as células e proteínas termolábeis. Esta característica do processo pode gerar gradientes de temperatura que tornam o sistema heterogêneo e alteram a sua eficiência de separação (PUI *et al.*, 1995; DOBLHOFF-DIER *et al.*, 1994; GAIDA *et al.*, 1996).

2.2. Hidrociclones

Hidrociclones (Figura 2.1) são dispositivos normalmente utilizados nas separações sólido-líquido, sólido-sólido, líquido-líquido e gás-líquido. A sua simplicidade confere facilidade de operação e de previsão de desempenho. Um hidrociclone consiste de uma seção cônica acoplada a uma cilíndrica, a qual possui uma ou mais entradas tangenciais em sua lateral. Esta seção cilíndrica é fechada na sua parte superior por uma placa com um duto central axial para o escoamento da corrente superior, conhecida como *overflow*. A extremidade da porção cônica inferior termina em um orifício de saída, permitindo o fluxo de uma corrente inferior, chamada de *underflow*. Hidrociclones utilizam o mesmo princípio das centrífugas, ou seja, sedimentação através de um campo centrífugo porém, não apresentam partes móveis e complexidade mecânica. A

alimentação do fluido é realizada pelas entradas tangenciais na parte cilíndrica, adquirindo um movimento espiralado em direção ao *underflow*, criando um campo centrífugo que resulta na sedimentação das entidades de maior densidade em direção à parede. O diâmetro reduzido do orifício inferior não permite que toda a suspensão seja descarregada, eliminando somente uma parte do fluido contendo as partículas mais densas ou maiores. A outra parte retorna em sentido contrário em um vórtice interno mais intenso, que é descarregado pelo *overflow*, carregando as partículas mais leves ou menores (MEDRONHO *et al.*, 2005).

A caracterização do escoamento de um hidrociclone pode ser realizada através da análise do perfil de velocidades tangenciais no interior do mesmo. Este perfil é bem definido e conhecido, sendo ilustrado, de maneira qualitativa na figura a seguir.

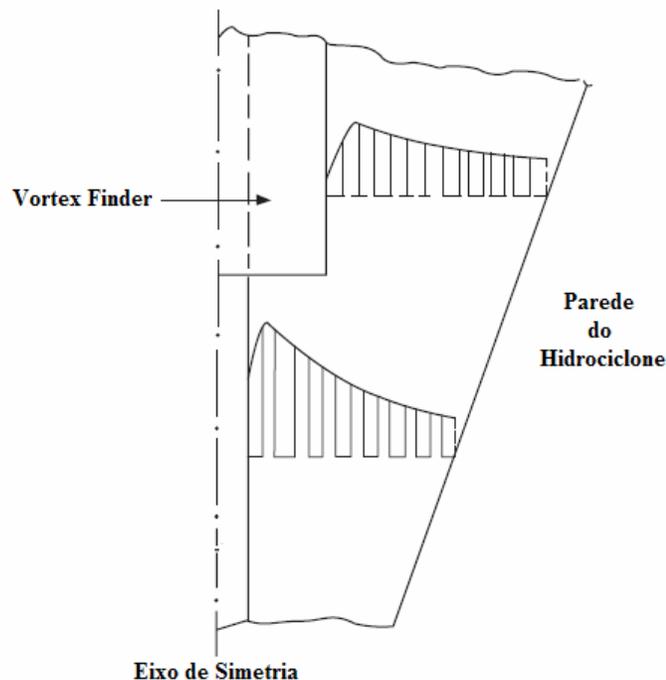


Figura 2.1– Perfil qualitativo de velocidades tangenciais típico de um hidrociclone (Svarovsky, 2000).

A aplicação de hidrociclones na biotecnologia é recente e somente nos últimos anos este dispositivo vem sendo estudado como uma alternativa promissora na separação de células animais (LÜBBERSTEDT *et al*, 2000a e 2000b). A figura 2.2 ilustra o padrão de fluxo interno de um hidrociclone.

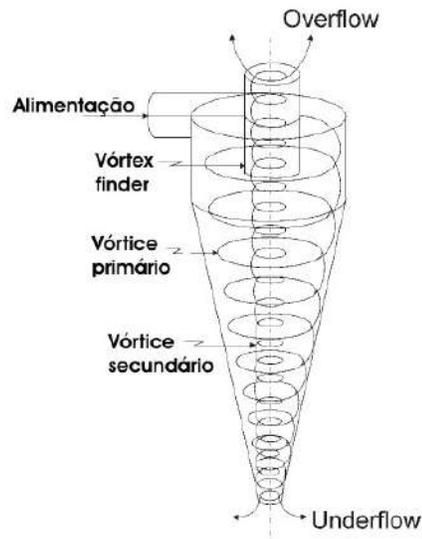


Figura 2.2– Vista em perspectiva de um hidrociclone e seu padrão de fluxo interno (PINTO et al. 2007).

Devido à enorme simplicidade, os hidrociclones são equipamentos altamente apropriados à aplicação em biorreatores em perfusão durante longos períodos de tempo. Como citado anteriormente, eles não apresentam partes móveis, sendo altamente apropriados para o uso em procedimentos estéreis, como os requeridos na indústria biotecnológica. Além disso, eles não necessitam de manutenção, o que evita riscos adicionais e permite a operação contínua por vários meses. Hidrociclones dimensionados especialmente para a indústria biotecnológica podem aumentar ainda mais a eficiência de separação, assim como reduzir a perda de viabilidade celular.

2.3. Fluidodinâmica Computacional (CFD)

Fluidodinâmica computacional (CFD) é o termo dado ao grupo de técnicas matemáticas, numéricas e computacionais, usadas para obter, visualizar e interpretar soluções para as equações de conservação de grandezas físicas de interesse em um dado escoamento. A origem dessas

equações de conservação remete à teoria dos fenômenos de transporte. Portanto, uma segunda definição adequada é a de que CFD é o conjunto das técnicas de simulação computacional usadas para prever os fenômenos físicos ou físico-químicos que ocorrem em escoamentos sob a ação e interação de fatores como dissipação, difusão, convecção e turbulência. No campo da fluidodinâmica todos esses fenômenos são governados pela equação de Navier-Stokes. A maioria das equações é não-linear e, como consequência, não possui solução analítica. Por isso, a utilização de métodos numéricos se faz necessário (FONTES et al., 2005).

É importante ressaltar que simulações em CFD possuem limitações. Na maioria dos casos, é necessário o desenvolvimento de modelos mais acurados como, por exemplo, nas áreas de turbulência, radiação, combustão, escoamentos multifásicos etc. A aplicação de condições de contorno necessita do desenvolvimento de ferramentas cada vez melhores para descrever em detalhe a geometria do domínio de cálculo. Existe a necessidade constante de aperfeiçoamento das técnicas numéricas para ampliar a capacidade de resolução dos problemas mais complexos (SILVA et al., 2006).

O uso de métodos numéricos para solução de equações diferenciais parciais introduz uma aproximação que pode mudar a forma básica dessas equações. Como as equações não são precisamente iguais às originais, elas podem e provavelmente irão simular os fenômenos físicos não exatamente da mesma forma que as equações básicas o fariam. Matematicamente, essas diferenças se referem aos erros de truncamento (aproximações numéricas) (MALISKA, 2004).

2.3.1. Método dos Volumes Finitos

Em problemas envolvendo escoamentos de fluido, é importante que a modelagem numérica atenda aos princípios da conservação.

O método dos volumes finitos obtém equações aproximadas (discretizadas), satisfazendo a conservação da propriedade para cada volume elementar do domínio discretizado. Neste método, o domínio é dividido em volumes de controle. Cada volume de controle contém apenas um ponto nodal

em seu centro. São nestes pontos que ocorrem a resolução das equações pertinentes ao fenômeno estudado e logicamente, quanto maior sua quantidade, mais precisa é a solução. Assim, as variáveis são definidas no centro dos volumes de controle, e as equações são integradas sobre estes volumes a fim de se obter uma equação discreta que conecta as variáveis de um dado volume de controle aos volumes vizinhos. As equações resolvidas por este método são as equações de conservação, ou seja, massa, momento e energia. A figura 2.3 mostra um volume finito genérico bidimensional (MALISKA, 2004).

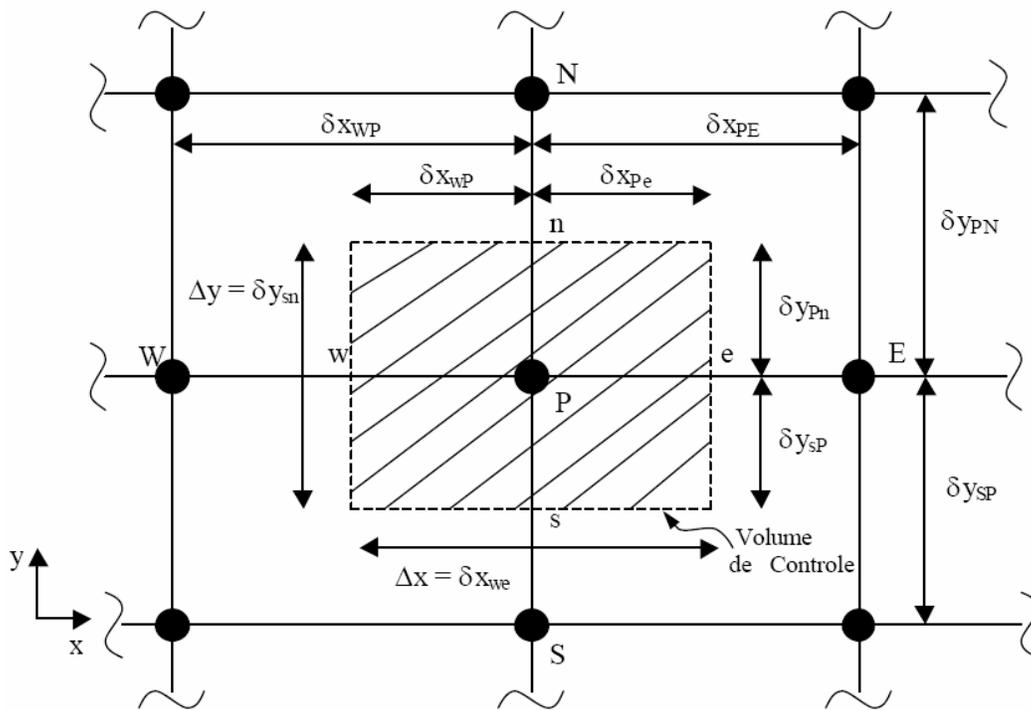


Figura 2.3– Representação de um volume de controle finito genérico em uma configuração bidimensional (BARREIRA et al., 2003).

O método dos volumes finitos aplicado à fluidodinâmica computacional apresenta notoriamente duas vantagens: discretização conservativa, ou seja, conservação das propriedades como massa, energia e momento no elemento de volume; e não requerimento de transformação de coordenadas para aplicações em malhas irregulares ou não estruturadas (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

2.3.2. Esquemas de Interpolação

A função de interpolação tem o objetivo de conectar os pontos nodais, que são os locais de armazenamento das variáveis sujeitas às equações de conservação. A tentativa é sempre utilizar uma função de interpolação com o menor truncamento possível e que não envolva muitos nós. As funções de interpolação podem permitir a ponderação entre as contribuições de advecção e difusão.

2.3.3. Esquemas de diferenças centrais (CDS)

Este esquema usa uma interpolação linear, podendo gerar coeficientes de discretização negativos, o que não é desejável. Trata-se de esquema de segunda ordem, não robusto e, portanto pouco utilizado.

2.3.4. Esquema Upwind

Esta função de interpolação evita os coeficientes negativos. É um esquema de interpolação de primeira ordem, onde o valor da função na interface é o mesmo no volume a montante. Tal característica é fisicamente realizável nos casos onde o transporte da propriedade é controlado pela convecção.

2.3.5. Difusão Numérica

A função de interpolação de diferenças centrais para os termos advectivos apresenta dois riscos: divergência da solução provocada pelo uso de métodos de solução de sistemas lineares não-aptos ao tratamento de coeficientes negativos, e a obtenção de soluções não realísticas, que apresenta oscilações numéricas, visto que o esquema de interpolação de diferenças centrais não dissipa as perturbações inerentes ao processo de solução (MALISKA, 2004).

Caso a interpolação usada seja Upwind, o esquema é bastante estável, obtendo-se sempre uma solução, mas com alta dissipação embutida. Esta dissipação ocorre nas regiões de grandes gradientes, podendo levar a uma solução falsa.

O operador Upwind tem a propriedade de suavizar os grandes gradientes. Este mecanismo de suavização é equivalente ao processo de difusão física de uma propriedade, sendo por isso denominado difusão numérica. O uso de funções de interpolação não-exatas gera erros de truncamento que podem estar associados a esquemas dissipativos ou não. Erros de truncamento associados às funções de interpolação do tipo diferenças centrais são erros não-dissipativos, e produzem então as oscilações numéricas. Já estes erros associados a funções de interpolação do tipo Upwind são dissipativos e suavizam os gradientes existentes no domínio, produzindo a difusão numérica (MALISKA, 2004).

Portanto, a difusão numérica resulta dos erros de truncamento de natureza dissipativa, associados aos termos advectivos. São originados pelo fato de a função de interpolação não ser exata.

2.3.6. Etapas de uma simulação fluidodinâmica

O primeiro passo na resolução de problemas envolvendo a fluidodinâmica computacional é a especificação do problema, incluindo geometria, condições de fluxo, e as necessidades da simulação. A geometria pode ser obtida a partir de medidas de uma configuração existente ou a partir do desenho da configuração a ser simulada. Um conjunto de objetivos deve ser especificado. As condições de contorno devem ser conhecidas, como por exemplo, vazões e pressões conhecidas.

Uma vez especificado o problema, equações e condições de contorno apropriadas devem ser escolhidas. No campo da fluidodinâmica, os fenômenos são governados pelas equações da conservação da massa, do momento e da energia. Estas equações são resolvidas em volumes de controle, que são escolhidos arbitrariamente, desde que estes contenham o fenômeno de interesse.

De modo a fornecer um meio mais fácil de resolver e analisar problemas de escoamentos de fluidos, a grande maioria de programas computacionais de CFD é subdividida em cinco elementos principais: um gerador de geometria, um gerador de malha, um pré-processador, um processador que obtém a solução e um pós-processador onde os resultados podem ser visualizados.

2.3.7. Gerador de Geometria

O primeiro passo para resolver um problema utilizando CFD é definir um volume de controle finito (usualmente chamado de domínio) onde se buscará a solução do problema. Esse domínio normalmente é introduzido através de programas de CAD (Computer Aided Design) que permitem modelar qualquer objeto no espaço tridimensional.

2.3.8. Gerador de Malha

Sendo o domínio criado, é necessário dividi-lo em pequenos subdomínios não sobrepostos, chamados elementos, pois a solução das equações de transporte pelos métodos numéricos envolve cálculos em subdomínios. Este processo de discretização é chamado de geração de malha (*grid* ou *mesh*).

Existem basicamente dois tipos de malhas: as estruturadas e as não-estruturadas. As malhas estruturadas são geradas pela subdivisão dos eixos coordenados em pequenos elementos unidimensionais, cujo produto cartesiano gera elementos bidimensionais e tridimensionais que são, geralmente, quadriláteros e hexaédricos, respectivamente. Nessas malhas, cada elemento tem sempre o mesmo número de elementos vizinhos, a não ser quando o mesmo pertence ao contorno.

As malhas não-estruturadas são produzidas de forma automatizada, contendo elementos que podem ter diversas formas. Em problemas bidimensionais, os elementos são polígonos: triângulos, quadriláteros, pentágonos etc, sendo mais comum o uso de triângulos. No caso tridimensional, os elementos são poliedros: tetraedros, pirâmides, prismas etc,

sendo os tetraedros os mais empregados. Essas malhas conseguem representar mais facilmente as geometrias mais complexas, devido à maior flexibilidade de forma que seus elementos podem assumir.

A precisão da solução em um problema de CFD depende do número de elementos e como estes estão distribuídos na malha. Em geral, a precisão da solução melhora com o aumento do número de elementos da malha. Contudo, é necessário balancear a precisão da solução através do refinamento da malha com o custo computacional de se obter a solução no hardware disponível.

2.3.9. Pré-Processamento

Consiste na modelagem de um problema de escoamento, com a estruturação destas informações de forma que o processador (*solver*) possa usá-las. A modelagem física envolve as seguintes informações:

- Seleção dos fenômenos físicos e/ou químicos que serão modelados e simulados;
- Definição das propriedades dos fluidos, como viscosidade, densidade, condutividade térmica etc.;
- Especificação das condições de contorno apropriadas nos elementos da malha associados ao contorno do domínio.

Os pré-processadores mais recentes fornecem um banco de dados com as propriedades físicas dos fluidos mais comuns e oferecem ao usuário diversos modelos físicos e químicos como: modelos de turbulência, transferência de calor radiante, transferência de massa, reações químicas, etc., já implementados no código ou, ainda, permitem a implementação de novos modelos.

2.3.10. Solvers

É a parte principal de um pacote de CFD, pois ele implementa as técnicas numéricas de solução e seus parâmetros para resolver os problemas

físicos do modo apropriado. Resumidamente, os métodos numéricos que formam a base do solver passam pelos seguintes passos:

- Aproximação das variáveis incógnitas do escoamento através de funções simples;
- Discretização, pela substituição das aproximações mencionadas acima nas equações de transporte que governam o escoamento, com manipulações matemáticas subseqüentes;
- Linearização do sistema de equações algébricas resultantes;
- Definição da estratégia de solução do sistema de equações algébricas lineares;
- Solução dos sistemas de equações algébricas lineares.

Existem várias técnicas numéricas de solução e suas diferenças estão associadas à forma com que as variáveis incógnitas são aproximadas e ao procedimento de discretização. Todas essas metodologias numéricas levam a sistemas de equações lineares (com matrizes cheias ou esparsas) com um grande número de equações e, portanto, uma abordagem numérica para a solução de tal sistema se torna necessária.

Durante a resolução das equações o usuário pode acompanhar o desenvolvimento da simulação através da visualização dos resíduos de cada equação. Dependendo do andamento da simulação o usuário pode alterar parâmetros e critérios estabelecidos no pré-processamento.

2.1.1. Pós-Processamento

Assim como no pré-processamento, um grande esforço de desenvolvimento no campo do pós-processamento foi realizado nos últimos anos. Devido aos avanços tecnológicos em software e hardware gráficos, os principais pacotes CFD estão equipados com ferramentas versáteis para visualização de campos escalares e vetoriais, incluindo:

- Visualização da geometria e da malha;
- Gráficos de vetores;

- Gráficos de contorno;
- Gráficos sobre superfícies no espaço tridimensional;
- Visualizações de linhas de fluxo e de trajetórias das partículas.

A maioria dessas ferramentas também inclui a possibilidade de criar animações para facilitar a análise do resultado. Em adição às diferentes formas de visualização, todos os códigos oferecem arquivos de resultados em diferentes padrões, que podem ser exportados para outro software de visualização.

Algumas das vantagens de CFD sobre métodos experimentais para o projeto de sistemas fluidos incluem:

- Redução substancial do tempo e dos custos de novos projetos;
- Capacidade de estudar sistemas onde experimentos controlados são muito difíceis, senão impossíveis;
- Obtenção de resultados com detalhamento quase ilimitado (com visualização o interior do escoamento), não agregando altos custos, como é o caso da construção de um aparato experimental e execução de experimentos.

É importante salientar que, embora os métodos computacionais ofereçam diversas vantagens, o uso de técnicas experimentais é de extrema importância na análise de problemas. Isto porque, mesmo que um caso simulado resulte em dados coerentes do ponto de vista numérico, a resposta obtida pode facilmente ser inconsistente com a realidade; ou então, mesmo estando fisicamente correta, pode apresentar alguma distorção dos resultados reais, e divergências como estas só podem ser percebidas quando comparadas com experimentos reais. A prática experimental e a simulação numérica não devem ser, portanto, separadas.

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

3.1. Conservação

Este capítulo apresenta as equações referentes à fluidodinâmica do escoamento em hidrociclones, ou seja, equações de escoamento multifásico e turbulento.

As equações de balanço de massa, momento e energia são resolvidas pelos softwares de CFD. No caso do hidrociclone estudado, a operação ocorre à temperatura constante. Assim, não é necessário levar em conta as equações de conservação de energia. Além das equações de balanço, são resolvidas também as equações dos modelos de turbulência.

3.2. Modelagem Monofásica

A modelagem do sistema em estudo se inicia a partir da aplicação dos princípios de conservação. Visto que a temperatura se mantém constante, apenas as equações de conservação da massa e do momento se fazem necessárias. Assim:

Conservação da massa (equação da continuidade):

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (3.1)$$

Conservação de momento:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\vec{\nabla}P - \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{g} \quad (3.2)$$

3.3. Turbulência

Tomando-se como base o estado atual de conhecimento acerca do fenômeno da turbulência, qualquer tipo de definição seria incompleta e pouco representativa. Entretanto, por outro lado, algumas características dos escoamentos turbulentos podem ser destacadas:

Irregularidade: os escoamentos turbulentos são de difícil predição determinística e o uso de ferramentas estatísticas é atualmente a única forma de análise. Neste sentido levanta-se a questão relativa a ser exclusivamente

um processo puramente randômico ou não. Assim, existem vertentes que defendem que, teoricamente, a turbulência é determinística. E outras que pregam que a visão mais realista seria considerar um meio termo, ou seja, determinística para as estruturas coerentes e randômicos para as pequenas estruturas.

Alta difusividade: a experiência mostra que o processo de mistura de todas as propriedades ligadas a um escoamento (momento, energia, contaminantes etc.) é muitas ordens de grandeza maior no regime turbulento que no laminar. Isto se deve ao fato de que, no regime turbulento, tem-se a presença de flutuações térmicas e de concentração, o que cria fortes e numerosos gradientes locais, tornando o processo de difusão molecular mais eficiente. Outra fonte homogenizadora é o transporte de parcelas de fluido para diferentes regiões do escoamento o que também gera fortes gradientes locais.

Altos números de Reynolds: a transição de um escoamento para o regime turbulento, bem como a sua manutenção dependem da importância relativa entre os efeitos convectivos e difusivos. Os efeitos convectivos altamente não lineares são efeitos amplificadores de perturbações e geradores de instabilidades. Por outro lado os efeitos difusivos são amortecedores ou inibidores da formação de instabilidades. O número de Reynolds (Re) é definido como a razão entre os efeitos convectivos e os efeitos difusivos. Desta forma um escoamento só poderá transicionar ou se manter turbulento quando Re for maior que a unidade.

Flutuações tridimensionais de vorticidade: a experiência mostra que qualquer escoamento turbulento é tridimensional. Constata-se ainda a presença de flutuações de vorticidade. Demonstra-se, a partir da equação de Helmholtz para o transporte da vorticidade que o único termo produtor desta grandeza é diferente de zero apenas em três dimensões. Fisicamente, vorticidade é gerada através do processo de estiramento de vórtices, o que é um mecanismo puramente tridimensional. Esta característica é importante para se identificar os fenômenos que não podem ser considerados como turbulentos.

A turbulência é um fenômeno altamente dissipativo: o processo de dissipação viscosa de energia cinética turbulenta, gerando aumento de energia interna, ocorre na região de altas frequências. Em regime turbulento completamente

desenvolvido toda a energia injetada no escoamento é passada adiante em um efeito cascata sobre o espectro de turbilhões até as frequências dissipativas.

A turbulência é um fenômeno contínuo: qualquer escoamento de fluidos newtonianos pode ser modelado utilizando-se as equações de Navier-Stokes. Se o fluido for não newtoniano estas equações devem ser modificadas no seu termo viscoso. É importante enfatizar que estas equações modelam qualquer escoamento independentemente do regime ser ou não turbulento. Demonstra-se, inclusive, que as menores escalas de comprimento da turbulência são ainda muito maiores que o livre caminho médio molecular do fluido em números de Mach inferiores a 15.

A turbulência é um fenômeno não-reprodutível: esta é uma característica relativa à incapacidade de reproduzir ou repetir um dado experimento. Mesmo no laboratório, sob condições extremas de controle, não é possível desenvolver duas realizações idênticas.

Do ponto de vista da simulação numérica, torna-se impossível reproduzir exatamente as condições iniciais e de contorno experimentadas no laboratório. Um escoamento turbulento tem, pelos efeitos não lineares, uma alta capacidade de amplificação destes pequenos erros, conduzindo a resultados completamente diferentes, em duas realizações que diferem minimamente nas condições iniciais e de contorno.

Neste contexto, tanto o método experimental como o teórico de estudo dos fenômenos turbulentos são factíveis. No entanto, os métodos teóricos se destacam cada vez mais devido aos avanços nos estudos de modelos do fenômeno e métodos sofisticados de solução. Neste quesito, destacam-se os desenvolvimentos de máquinas com poder de cálculo e armazenamento de dados cada vez maiores. Apesar de ainda existirem limitações quanto ao poder de resolução dos métodos teóricos.

No que tange aos modelos pertencentes à abordagem teórica, estes podem ser distinguidos em duas grandes famílias: modelos contemporâneos e clássicos. A utilização de cada um depende exclusivamente do poder computacional que se dispõe.

Os modelos contemporâneos surgiram em consonância com uma nova filosofia de modelagem e de simulação, trata-se da modelagem sub-malha e da Simulação de Grandes Escalas (SGE). Com a metodologia de SGE objetivam-se a obtenção de informações instantâneas assim como de informações estatísticas. Neste caso é possível o uso de métodos teóricos para se compreender fisicamente a turbulência. Observa-se o comportamento dinâmico da solução (sinal), guardando-se frequências que serão tão mais elevadas quanto maior for a capacidade computacional disponível. Caso todas as frequências sejam capturadas, explicitamente insere-se o conceito de Simulação Numérica Direta (SND), em contraste com SGE com a qual se resolve apenas uma parte do espectro (frequências selecionadas).

Os modelos clássicos seguem a filosofia de modelagem adicional dos efeitos físicos ligados exclusivamente ao fenômeno da turbulência e podem ser subdivididos em famílias de acordo com a quantidade de equações de transporte adicionais inseridas na modelagem. Estes modelos interessam-se pelo comportamento médio e por informações puramente estatísticas do escoamento turbulento. Ou seja, baseiam-se na proposição de um processo de decomposição das equações governantes, de tal forma que se analise o comportamento médio do escoamento e modele suas flutuações. Esta decomposição conduz ao chamado problema de fechamento da turbulência (MALISKA, 2004).

A figura a seguir ilustra a diferença de informação obtida respectivamente pela abordagem teórica clássica e contemporânea.

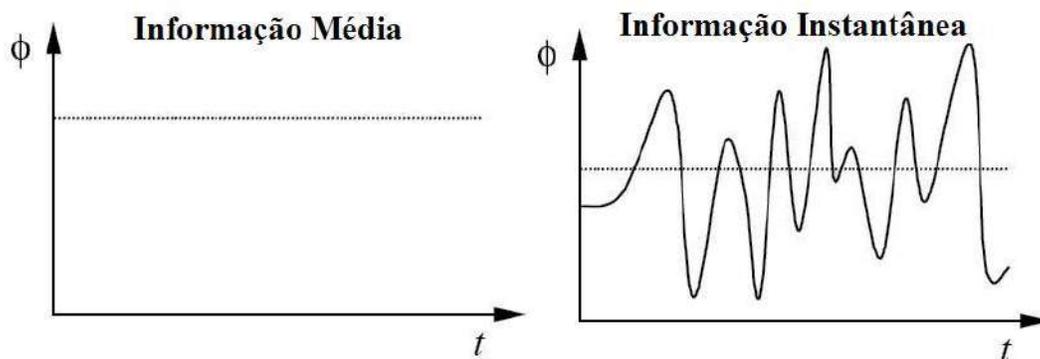


Figura 3.1– Tipos de informações obtidas em um escoamento turbulento (NETO, A. S., LTCM-UFU).

A grande maioria dos escoamentos é cisalhante. Este cisalhamento aliado a perturbações diversas é responsável por gerar instabilidades no mesmo que levam ao fenômeno conhecido como turbulência. Estas instabilidades apresentam-se em dois tipos de estruturas, algumas menores, que apresentam tendência à isotropia e homogeneidade, e outras maiores, chamadas estruturas coerentes, que quando observadas se mostram anisotrópicas. Homogeneidade é a invariância estatística das propriedades do escoamento ao se promover uma translação em um sistema de eixo (propriedade direcional). Por anisotropia entende-se variância estatística das mesmas propriedades em relação à rotação em um sistema de eixos. Deste modo, um escoamento isotrópico é homogêneo, mas o inverso não necessariamente é verdadeiro.



Figura 3.2– Estruturas turbulentas (NETO, A. S., LTCM-UFU).

Assim, um escoamento turbulento apesar de agir caótica e irregularmente, contém estruturas que tendem à isotropia. Ou seja, apresenta um espectro de diferentes escalas (tamanho dos turbilhões) onde os maiores turbilhões são da ordem da geometria do escoamento e os menores têm a capacidade de ter sua energia dissipada em energia interna pela ação das forças viscosas. Em outras palavras, um escoamento turbulento apresenta uma multiplicidade de escalas (MALISKA, 2004).

Os grandes turbilhões extraem sua energia cinética do escoamento médio, que tem uma escala de tempo comparável às grandes escalas (aqui se fala de coerência estatística para as estruturas que mantêm uma forma geométrica definida por um tempo superior ao seu tempo característico, por exemplo, o tempo de rotação). Ou seja, para que um escoamento permaneça turbulento, é necessário fornecer energia continuamente. Estes turbilhões, através da interação com turbilhões menores, perdem sua energia cinética. Esta cascata ocorre até a escala onde as forças viscosas se tornam grandes o suficiente, quando comparadas à energia cinética, que forçam a dissipação

desta última em energia interna. Estas menores escalas são conhecidas como escalas de Kolmogorov. A partir do estudo desenvolvido por Kolmogorov, pode-se conhecer a escala em que os efeitos viscosos superam os efeitos de inércia.

$$l_d = \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (3.3)$$

Onde:

l_d – Comprimento de escala dissipativa

ν – Viscosidade do fluido

ε – Taxa de dissipação de energia cinética

Assim, turbilhões que contenham comprimentos inferiores à l_d , têm ações viscosas que superam as cinéticas e promovem uma dissipação em energia interna. Esta análise permite entender porque o espectro de energia cinética (que é definido a partir do traço do tensor espectral) em um escoamento turbulento cai tão rapidamente em uma das regiões. Este evento permite classificar o espectro de energia cinética em duas zonas; inercial e de dissipação viscosa.

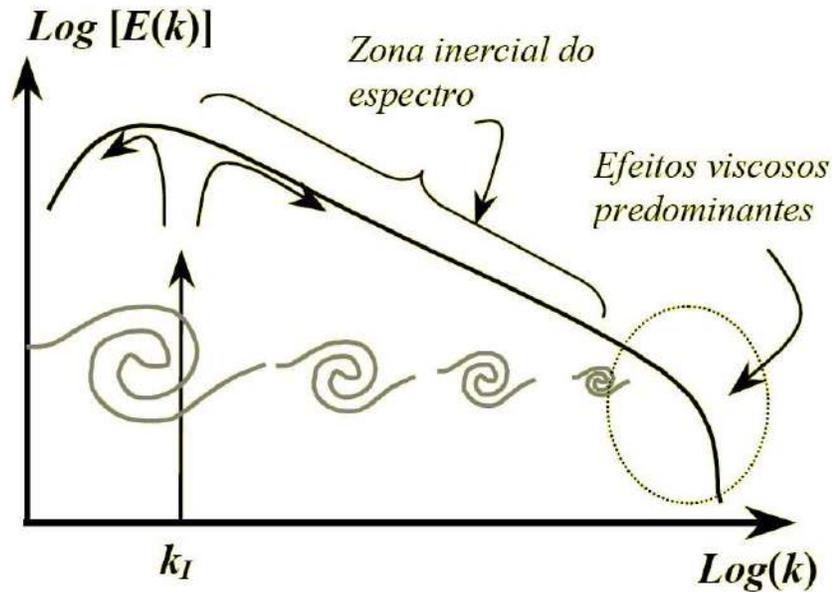


Figura 3.3– Gráfico do espectro de energia cinética versus número de onda. Quanto maior o número de onda, menor o comprimento do turbilhão (NETO, A. S., LTCM-UFU).

A análise dimensional promovida por Kolmogorov ainda chega a um resultado para o limite de aplicabilidade da consideração de fluido contínuo, ou seja, da aplicação as equações de Navier-Stokes. Conforme equação exibida a seguir.

$$\frac{\xi}{l_d} = \frac{Ma}{Re_L^{1/4}} \quad (3.4)$$

Onde:

ξ – Livre percurso médio da partícula.

l_d – Comprimento de escala dissipativa.

Ma – Número de Mach.

Re_L – Número de Reynolds local (depende da velocidade local, raio do turbilhão e viscosidade)

Em uma primeira análise, pode-se dizer que a escala característica molecular, ξ , é sempre muito menor que a escala dissipativa l_d uma vez que

mesmo para altíssimos números de Mach o número de Reynolds deve ser ainda muito superior a ele, de forma que esta relação seria sempre muito menor que a unidade. No entanto um cuidado especial deve ser tomado, pois à medida que Reynolds aumenta a escala dissipativa l_d tende às escalas moleculares. Segundo a literatura, para Mach acima de 15 estas duas escalas começam a se confundir. Esta informação é extremamente importante, pois isto implicaria em dizer que as equações de Navier-Stokes não são mais representativas dos escoamentos com $Ma > 15$. Sendo assim, neste caso, as equações alternativas do tipo Boltzman deveriam ser utilizadas. Felizmente, para quase a totalidade dos problemas práticos da atualidade Mach não supera esta marca, mesmo para os escoamentos com fortes efeitos de aquecimento.

3.3.1. Equações da turbulência

A multiplicidade de escalas que caracteriza o fenômeno da turbulência é um dos fatores preponderantes na complexidade de resolução de tais problemas. Ela representa o número de graus de liberdade de um escoamento turbulento. Em outras palavras, o número de equações a serem resolvidas simultaneamente em um sistema linear que modele o problema. Como os graus de liberdade aumentam a medida que o número de Reynolds cresce, é atualmente inviável a solução de problemas práticos da engenharia moderna de forma direta. Assim, a partir deste problema, surgiu a idéia de decomposição das escalas de turbulência (MALISKA, 2004).

O processo de decomposição deu origem a dois grupos de equações:

- Equações médias de Reynolds
- Equações de Navier-Stokes filtradas

No primeiro grupo, as escalas de turbulência são separadas em relação ao comportamento médio e às flutuações diante deste comportamento médio. Já no segundo, a separação se dá pelo tamanho da escala, ou seja, grandes escalas e pequenas escalas, também chamadas sub-malha.

3.3.2. Equações Médias de Reynolds

Esta abordagem se inicia através da separação de um sinal genérico (uma propriedade qualquer) em sua parte média e sua parte flutuante:

$$f(\vec{x}, t) = \left\langle f(\vec{x}) \right\rangle + f'(\vec{x}, t) \quad (3.5)$$

Onde:

$f(\vec{x}, t)$ - Sinal genérico.

$\left\langle f(\vec{x}) \right\rangle$ - Média do sinal genérico.

$f'(\vec{x}, t)$ - Flutuação do sinal genérico.

Considerando-se as equações de conservação de massa, momento e energia, para escoamentos incompressíveis e de fluidos newtonianos, na qual o problema de escoamento no interior de um hidrociclone se aplica, tem-se:

Conservação da massa

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.6)$$

Aplicando o operador média sobre esta equação, utilizando conjuntamente a propriedade comutativa entre este operador e o operador derivada parcial, tem-se a conservação da massa para as médias das componentes da velocidade:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.7)$$

Subtraindo-se em seguida a equação geral da média, tem-se a conservação da massa para as flutuações das componentes da velocidade, conforme definição dada inicialmente:

$$\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.8)$$

Conservação do momento

$$\frac{\partial ui}{\partial t} + \frac{\partial(ui \cdot uj)}{\partial xj} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial xi} + \frac{\partial}{\partial xj} \cdot \left[\nu \cdot \left(\frac{\partial ui}{\partial xj} + \frac{\partial uj}{\partial xi} \right) \right] \quad (3.9)$$

Utilizando-se um procedimento análogo ao da conservação de massa, encontra-se:

$$\frac{\partial \bar{u}i}{\partial t} + \frac{\partial(ui \cdot uj + \bar{u}'i \cdot \bar{u}'j)}{\partial xj} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \bar{p}}{\partial xi} + \frac{\partial}{\partial xj} \cdot \left[\nu \cdot \left(\frac{\partial \bar{u}i}{\partial xj} + \frac{\partial \bar{u}j}{\partial xi} \right) \right] \quad (3.10)$$

Deve ser observado que a consequência imediata do processo de decomposição de escalas e da transformação das equações originais em equações médias, é o aparecimento de um tensor adicional. Este é conhecido como tensor de Reynolds e pode ser reescrito na seguinte forma matricial:

$$\bar{\tau} = \begin{bmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{v'u'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{w'u'} & \overline{w'v'} & \overline{w'w'} \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

Verifica-se que este tensor é simétrico, ou seja, $\tau_{ij} = \tau_{ji}$. Ressalta-se que este tensor tem natureza física semelhante ao tensor viscoso molecular, apesar de sua origem, ligada ao termo não linear. Desta forma é natural transpor este tensor para o segundo membro da equação de conservação e agrupá-lo com o tensor viscoso:

$$\frac{\partial \bar{u}i}{\partial t} + \frac{\partial(ui \cdot uj)}{\partial xj} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \bar{p}}{\partial xi} + \frac{\partial}{\partial xj} \cdot \left[\nu \cdot \left(\frac{\partial \bar{u}i}{\partial xj} + \frac{\partial \bar{u}j}{\partial xi} \right) - \bar{u}'i \cdot \bar{u}'j \right] \quad (3.12)$$

Assim, levando-se em conta a simetria do tensor de Reynolds, têm-se seis incógnitas a mais. Fazendo-se necessário modelar este tensor. E é neste ponto que se podem dividir os modelos de turbulência em dois grandes grupos. Os que modelam o tensor de Reynolds através da inserção do conceito de viscosidade turbulenta, e os que o modelam diretamente, ou seja, sem a introdução da viscosidade turbulenta. O grupo que compreende a viscosidade turbulenta tem como principal componente o modelo k-ε. Já o segundo grupo

tem o modelo das Tensões de Reynolds (ou modelo a seis equações) como modelo mais utilizado (MALISKA, 2004).

3.3.3. O Conceito de Viscosidade Turbulenta

A partir de uma analogia com o modelo de tensões viscosas moleculares proposto por Stokes, Boussinesq estabeleceu o conceito de viscosidade turbulenta propondo o seguinte modelo de fechamento para o Tensor de Reynolds:

$$-\bar{u}'i \cdot \bar{u}'j = \nu_t \cdot \left(\frac{\partial \bar{u}i}{\partial xj} + \frac{\partial \bar{u}j}{\partial xi} \right) - \frac{2}{3} \cdot k \delta_{ij} \quad (3.13)$$

Onde:

$$k \equiv \frac{1}{2} \cdot (\bar{u}'i \cdot \bar{u}'j) = \frac{1}{2} \cdot (\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2) \quad (3.14)$$

k é a energia cinética turbulenta. O conceito de viscosidade turbulenta relaciona a tensão turbulenta diretamente com a deformação do escoamento médio de modo análogo à tensão cisalhante e o gradiente de velocidade de um escoamento newtoniano.

Substituindo este novo conceito nas equações média de conservação de momento:

$$\frac{\partial \bar{u}i}{\partial t} + u_j \cdot \frac{\partial \bar{u}i}{\partial xj} = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \left(\bar{p} + \frac{2}{3} \cdot k \right)}{\partial xi} + \frac{\partial}{\partial xj} \cdot \left[(\nu + \nu_t) \cdot \left(\frac{\partial \bar{u}i}{\partial xj} + \frac{\partial \bar{u}j}{\partial xi} \right) \right] \quad (3.15)$$

A viscosidade turbulenta não é uma propriedade do fluido, como a viscosidade cinemática. É sim do escoamento. Seu valor varia de ponto a ponto e no tempo, de acordo com as características específicas de cada escoamento. Isto implica em uma maior dificuldade de avaliação da propriedade e constitui uma forte não-linearidade na solução das equações.

3.3.4. O Modelo k-ε

O conceito de viscosidade turbulenta fornece uma base para a inserção de modelos, mas não é por si só caracterizada como um modelo. Com sua inserção, a modelagem da turbulência passa ao patamar de modelar a viscosidade turbulenta.

O modelo k-ε está inserido dentro do conjunto de modelos que seguem o conceito de viscosidade turbulenta, chamados modelos a duas equações de transporte. No caso do k-ε, as duas equações inseridas são para a energia cinética turbulenta e para a dissipação da energia cinética turbulenta. Em tese, o modelo k-ε é suficiente para calcular diferentes tipos de escoamentos sem a necessidade de se conhecer as estruturas dos mesmos. Isto seria verdadeiro caso não se tivesse que ajustar um número muito grande de constantes que, normalmente, são dependentes do tipo de escoamento considerado (MALISKA, 2004).

As equações reativas ao modelo k-ε são:

Viscosidade turbulenta cinemática

$$vt = \rho \cdot C_v \cdot \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.16)$$

Energia cinética turbulenta

$$\rho \cdot \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \cdot u \cdot \frac{\partial k}{\partial x_j} = -\rho \cdot \bar{u}'_i \cdot \bar{u}'_j \cdot \frac{\partial(ui)}{\partial x_j} - \rho \cdot \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left[\left(\nu + \frac{vt}{\sigma_k} \right) \cdot \left(\frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \right] \quad (3.17)$$

Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta

$$\rho \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \cdot u_j \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left[\left(\nu + \frac{vt}{\sigma_\varepsilon} \right) \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] - C_{\varepsilon 1} \cdot \frac{\varepsilon}{k} \cdot \rho \cdot \bar{u}'_i \cdot \bar{u}'_j \cdot \frac{\partial ui}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \cdot \rho \cdot \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.18)$$

3.3.5. Modelo dos Tensores de Reynolds

Os modelos de turbulência a duas equações oferecem boas predições para a maioria dos casos de relevância industrial. Entretanto, nos fluxos onde os efeitos de transporte turbulento ou de não-equilíbrio são importantes, a suposição da viscosidade turbulenta não é mais válida e os resultados dos

modelos podem ser imprecisos. Os modelos dos tensores de Reynolds (ou de segundo fechamento do momento - SMC) incluem naturalmente os efeitos da curvatura das linhas de corrente, mudanças repentinas na variação de velocidade (taxa de tensão), fluxos secundários ou empuxo, quando comparados aos modelos de turbulência que usam a aproximação de viscosidade turbulenta. Pode-se considerar a utilização dos modelos com tensores de Reynolds nos seguintes tipos de escoamento (FONTES et al., 2005):

- Fluxos com cisalhamento livre, de forte anisotropia, como um forte redemoinho. Isto inclui fluxos com líquidos girando.
- Os fluxos com mudanças repentinas na tensão média.
- Fluxos onde os campos da tensão são complexos, e reproduzem a natureza anisotrópica da própria turbulência.
- Fluxos com forte curvatura das linhas de corrente.
- Fluxo secundário.
- Fluxos nos qual o empuxo é relevante.

Os modelos dos tensores de Reynolds mostraram um desempenho superior quando comparados aos modelos de viscosidade turbulenta nestes casos. Esta é a principal justificativa para utilização dos modelos dos tensores de Reynolds, que são baseados em equações de transporte para os componentes individuais do tensor de Reynolds e da taxa da dissipação. Estes modelos são caracterizados por um grau mais elevado de universalidade, ou seja, flexibilidade. A penalidade para esta flexibilidade é um elevado grau de complexidade no sistema matemático resultante. O elevado número de equações de transporte conduz a uma robustez numérica reduzida, requer um esforço computacional aumentado e impede, frequentemente, seu uso em fluxos complexos.

Teoricamente, os modelos de tensores de Reynolds são mais úteis aos fluxos complexos, entretanto, a prática mostra que não são frequentemente superiores aos modelos de duas equações quando analisados para soluções próximas a parede, por exemplo.

Comparado ao modelo k-ε, o modelo dos tensores de Reynolds tem seis equações adicionais de transporte que são resolvidas para cada passo de tempo. Os termos fonte nas equações dos tensores de Reynolds são também mais complexos do que aqueles do modelo k-ε. Em consequência destes fatores, a convergência do “loop” pode ser mais lenta para o modelo de tensores de Reynolds do que para o k-ε. A princípio, o mesmo passo de tempo pode ser usado para todas as variáveis do modelo de turbulência, entretanto, considerando observações práticas, o passo deve ser reduzido para o modelo dos tensores de Reynolds devido à maior complexidade de suas equações e aproximações numéricas feitas nas interfaces gerais da malha (FONTES et al., 2005).

As equações de transporte para as tensões de Reynolds em um escoamento incompressível de fluido newtoniano, com propriedades constantes são exibidas a seguir:

$$\frac{\partial(\bar{u}'i \cdot \bar{u}'j)}{\partial t} + u_k \cdot \frac{\partial(\bar{u}'i \cdot \bar{u}'j)}{\partial x_k} = Pij - \epsilon_{ij} + \phi_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} \cdot \left(\nu \cdot \frac{\partial(\bar{u}'i \cdot \bar{u}'j)}{\partial x_k} - Cijk \right) \quad (3.19)$$

Onde os termos são:

Termo de produção

$$Pij = -\bar{u}'i \cdot \bar{u}'j \cdot \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \bar{u}'i \cdot \bar{u}'j \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \quad (3.20)$$

Termo de dissipação

$$\epsilon_{ij} = 2\nu \cdot \frac{\partial \bar{u}'i}{\partial x_k} \cdot \frac{\partial \bar{u}'i}{\partial x_k} \quad (3.21)$$

Termo de pressão deformação

$$\phi_{ij} = \frac{\bar{p}}{\rho} \left(\frac{\partial \bar{u}'i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}'j}{\partial x_i} \right) \quad (3.22)$$

Termo de transporte turbulento

$$Cijk = (\bar{u}'i \cdot \bar{u}'j \cdot \bar{u}'k) + \delta_{ik} \cdot \frac{\bar{u}'i \cdot \bar{p}'}{\rho} + \delta_{jk} \cdot \frac{\bar{u}'j \cdot \bar{p}'}{\rho} \quad (3.23)$$

3.4. Modelo para a Região Próxima à Parede

O local onde as tensões de cisalhamento são mais críticas são as regiões de parede. Nestas regiões, é aconselhável calcular a tensão através de funções empíricas devido à condição de não deslizamento. Na aproximação das funções de parede, são empregadas fórmulas empíricas para fornecer condições limites próximas às paredes para as equações médias do fluxo e do transporte turbulento (CFX-11 Solver Theory). Estas fórmulas conectam as condições da parede às variáveis dependentes da malha próxima à mesma. A relação logarítmica para a velocidade próxima da parede pode ser expressa por:

$$u^* = C_\mu^{1/4} \cdot k^{1/2} \quad (3.24)$$

Onde:

u^* - Velocidade próxima a parede

Esta expressão tem a cômoda propriedade de não tender a zero quando a velocidade tangencial à parede tende a zero, pois k nunca é completamente zero em escoamentos turbulentos. Assim, a velocidade de fricção é explicitamente dada por:

$$u_t = \frac{U_t}{\frac{1}{k} \cdot \ln(y^*) + C} \quad (3.25)$$

Onde:

$$y^* = \frac{(\rho \cdot u^* \cdot \Delta y)}{\mu} \quad (3.26)$$

Sendo o Δy igual à distância entre o primeiro e o segundo nós contados a partir da parede.

O valor absoluto da tensão na parede é então expresso por:

$$\tau_{\omega} = \rho \cdot u^* \cdot u_t \quad (3.27)$$

4. SIMULAÇÕES

Os estudos foram divididos em duas etapas. Primeiramente, foram realizados estudos da malha em simulações estacionárias utilizando modelo k- ϵ para a geometria do hidrociclone base (Geometria 1). Posteriormente, foram realizados estudos transientes com as malhas selecionadas para as três geometrias.

Os estudos transientes foram realizados para se ter certeza de que o estado do escoamento obtido é um estado bem representado. Nas simulações realizadas em regime estacionário os resíduos das equações podem ser suficientemente baixos, entretanto o escoamento pode não representar a realidade. Este evento ocorre por culpa das chamadas difusões numéricas. As equações de balanço solucionadas pelo software são todas dependentes do tempo e assim, as soluções destas equações em estado estacionário são apenas soluções para as equações aproximadas. Deste modo, nem sempre a aproximação é válida, podendo haver convergência para um resultado irreal. Em casos extremos, a simulação pode até divergir.

Como o interesse deste estudo em particular não é a melhora da eficiência de separação e sim a redução da tensão de cisalhamento, tendo-se em vista que os cultivos de células animais em suspensão são relativamente diluídos (aproximadamente 10^7 cel/ml, podendo chegar no máximo a uma concentração equivalente a 5% v/v), optou-se por realizar apenas simulações monofásicas. Utilizou-se água como fluido de trabalho, pois esta tem características bem similares aos meios de cultura utilizados.

As seções que se seguem descrevem as etapas do estudo realizado em CFD pelo presente trabalho. Todas as simulações, pré-tratamento e pós-processamentos foram realizados com o software CFX 11.0, da ANSYS. As geometrias e respectivas malhas foram geradas no pacote computacional Workbench, também da ANSYS.

4.1. Geração da Geometria

As figuras 4.1 e 4.2 a seguir exibem as três geometrias estudadas, doravante chamadas Geometria 1, Geometria 2 e Geometria 3. A Geometria 1 é a referente ao hidrociclone existente. Como pode ser observada, a diferença entre as três geometrias se encontra na entrada do equipamento. A Geometria 1 tem uma entrada tangencial ao corpo do equipamento a partir de um tubo reto, enquanto que na Geometria 2 a entrada é em voluta e a Geometria 3 tem uma inclinação de 11° do tubo de entrada em relação ao corpo do equipamento.

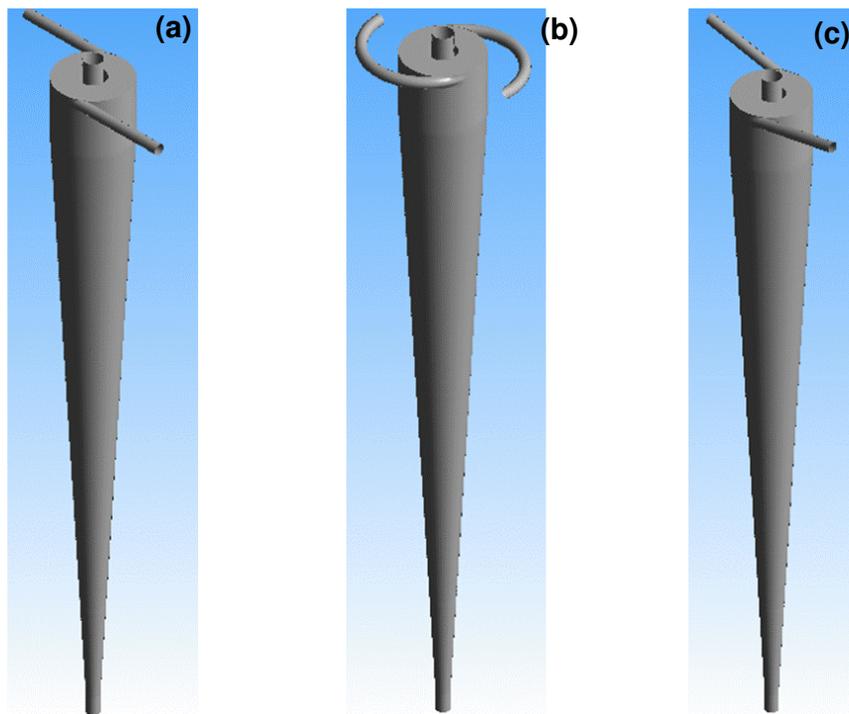


Figura 4.1 – Geometrias utilizadas para simulação. Geometria 1 (a), Geometria 2 (b) e Geometria 3 (c).

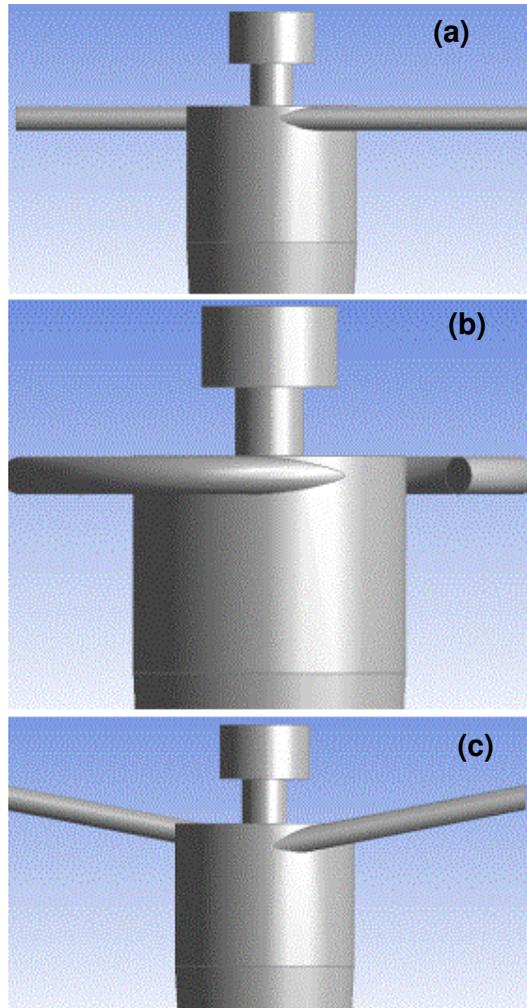


Figura 4.2 – Parte superior das geometrias utilizadas para simulação. Geometria 1 (a), Geometria 2 (b) e Geometria 3 (c).

As dimensões relativas às três geometrias são ilustradas na figura 4.3 e na tabela 4.1 que se segue.

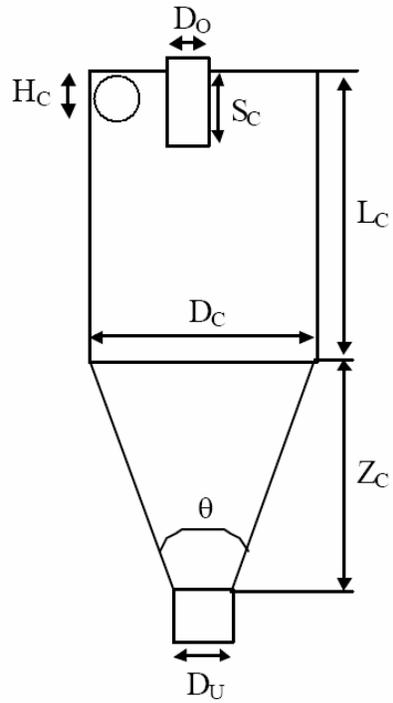


Figura 4.3 – Desenho técnico de um hidrociclone genérico.

Tabela 4.1 – Dimensões dos hidrociclones simulados – unidades em mm.

	Geometrias 1, 2 e 3
Do	2,5
Du	1,7
Dc	10
Hc	1,4
Sc	2,5
Lc	8
Zc	79,2
Teta	6

4.2. Geração e Seleção das Malhas

Um dos passos mais importantes de uma simulação em CFD é a geração da malha. Esta etapa consiste na geração dos pontos nos quais serão resolvidas todas as equações pertinentes ao problema estudado. Deste modo é fácil perceber que quanto maior o número de nós (ou pontos) gerados, mais precisa estará a solução e maior será a demanda de esforço computacional. Entretanto, o aumento do número de nós tem um limite a partir do qual, um aumento da quantidade de pontos de solução provoca um aumento do esforço computacional, mas mantém a precisão inalterada. O ideal é encontrar o estado que contenha a menor quantidade de nós que forneça a maior precisão possível. Este estado é encontrado promovendo simulações com malhas de diferentes números de nós, analisando-se em cada uma, o valor de um parâmetro chave do projeto. O número de pontos da malha numérica necessários para fornecer uma solução acurada e a maneira como os mesmos se distribuem no domínio de cálculo são questões que dependem da natureza do problema a ser resolvido. Estudos usando malhas com poucos pontos nodais podem ser um modo conveniente de se compreender a natureza da solução. Esta abordagem encontra base nos procedimentos experimentais, onde testes preliminares são conduzidos e as informações resultantes são utilizadas para decidir o número e a localização dos pontos de medição a serem instalados no experimento final. A figura adiante ilustra um gráfico hipotético de análise de malha, com o estado ótimo em destaque.

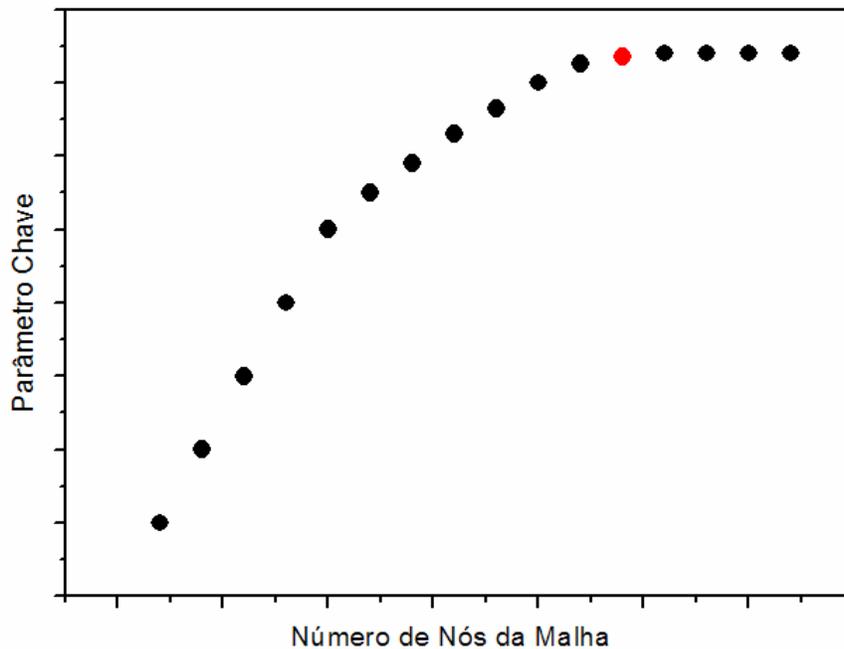


Figura 4.4 – Gráfico ilustrativo de um estudo de malhas. O ponto em destaque exibe a malha que fornece a maior precisão, com o menor esforço computacional possível.

Com o intuito de se ter uma idéia do número de nós a ser utilizado para as simulações deste trabalho, realizou-se inicialmente um estudo de malhas simplificado. Para que não fosse gasto muito tempo nesta etapa, optou-se por realizar simulações estacionárias utilizando o modelo $k-\epsilon$, mesmo não sendo o modelo ideal para este tipo de escoamento. O parâmetro utilizado para comparação dos resultados é a velocidade tangencial, visto que seu perfil é bem definido e estudado na literatura. O resultado é exibido a seguir:

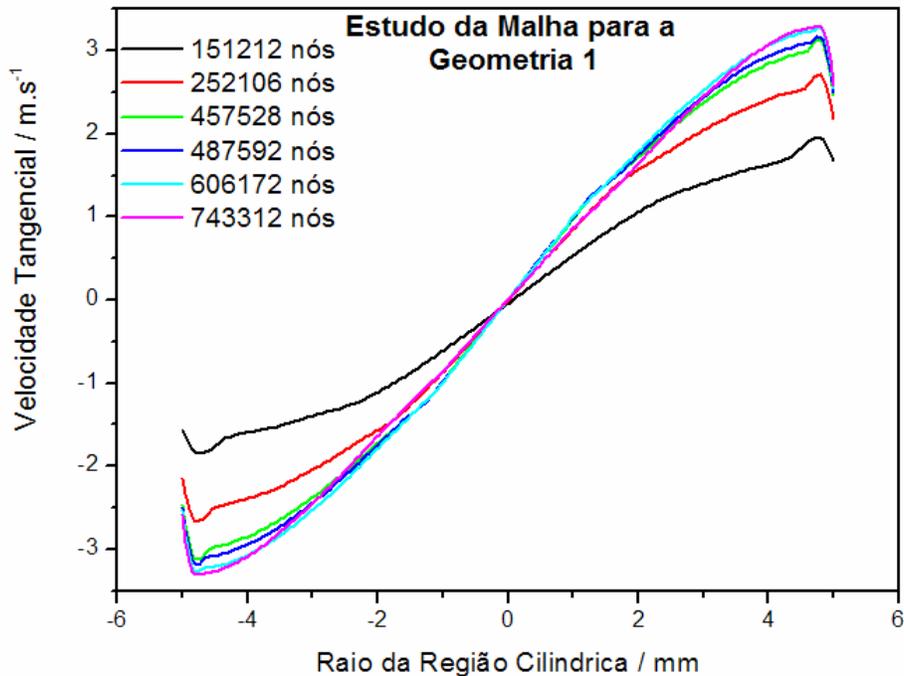


Figura 4.5 – Gráfico de velocidade tangencial versus raio do hidrociclone. A variação do perfil de velocidades tangenciais ilustra a influência da malha no resultado da simulação.

Para não exigir um esforço computacional demasiado e tendo em vista a natureza qualitativa a que o presente estudo se propõe, optou-se por utilizar uma malha com aproximadamente 200.000 nós. Percebe-se através deste estudo que a malha deixa de influenciar os resultados a partir de 600.000 nós aproximadamente. Sendo assim, a utilização de uma malha com uma quantidade de nós tão menor quanto a ideal se dá por causa da realização das simulações transientes, que demandam um grande tempo computacional. Deste modo, optou-se por sacrificar o resultado quantitativo, atendo-se apenas às informações qualitativas para conhecer qual seria a melhor geometria do duto de alimentação.

As malhas foram geradas no módulo CFX-Mesh do software Workbench 11.0 da ANSYS. Apenas foram geradas malhas não estruturadas com elementos tetraédricos e prismáticos.

Utilizaram-se elementos com comprimento característico de aproximadamente 0,45 mm. Nas paredes do equipamento foram inseridas 6 (seis) camadas de prisma, através da ferramenta “Inflation”. A malha superficial

também foi refinada. As figuras que se seguem, exibem as malhas superficiais e volumétricas obtidas para as três geometrias.

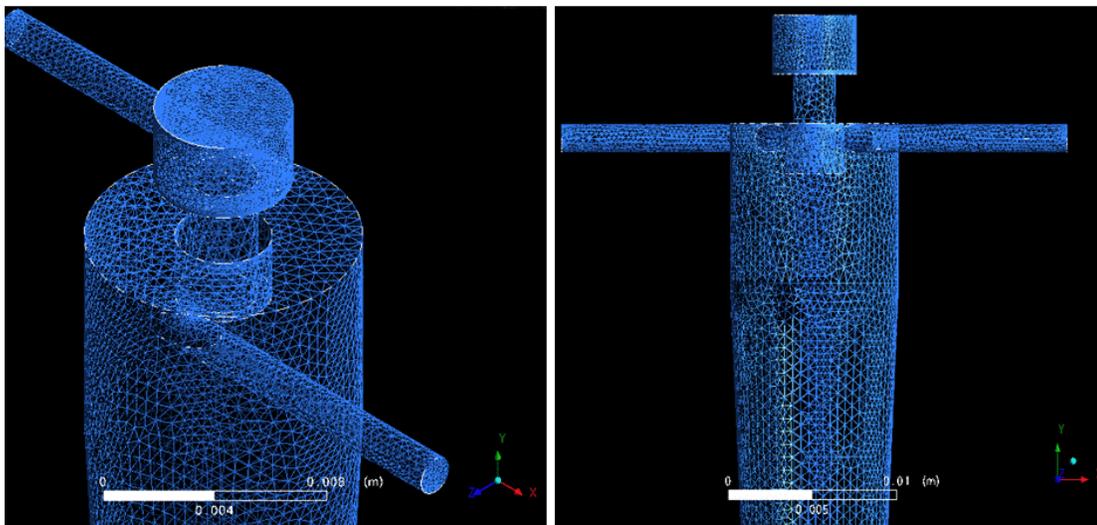


Figura 4.6 – Malha superficial da Geometria 1.

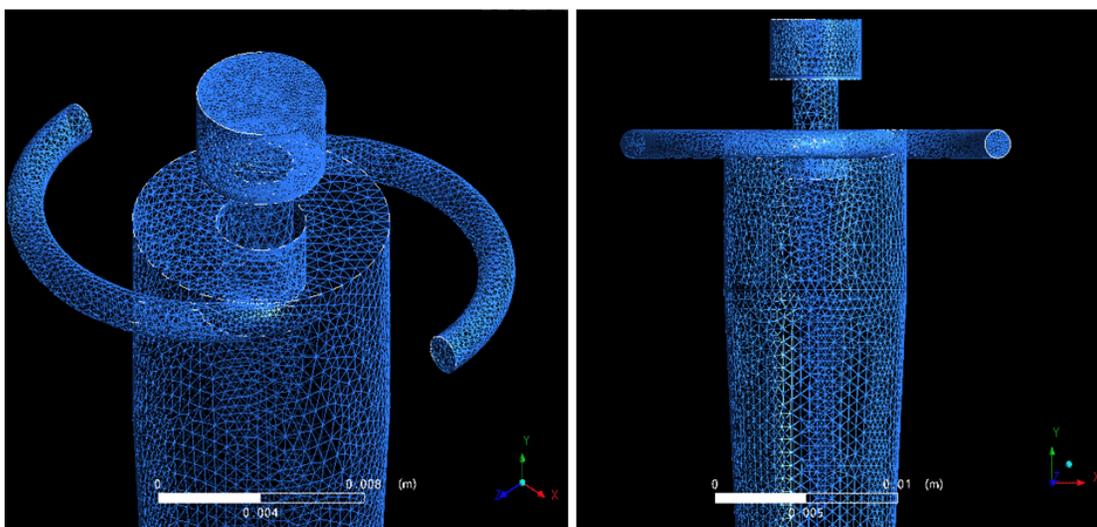


Figura 4.7 – Malha superficial da Geometria 2.

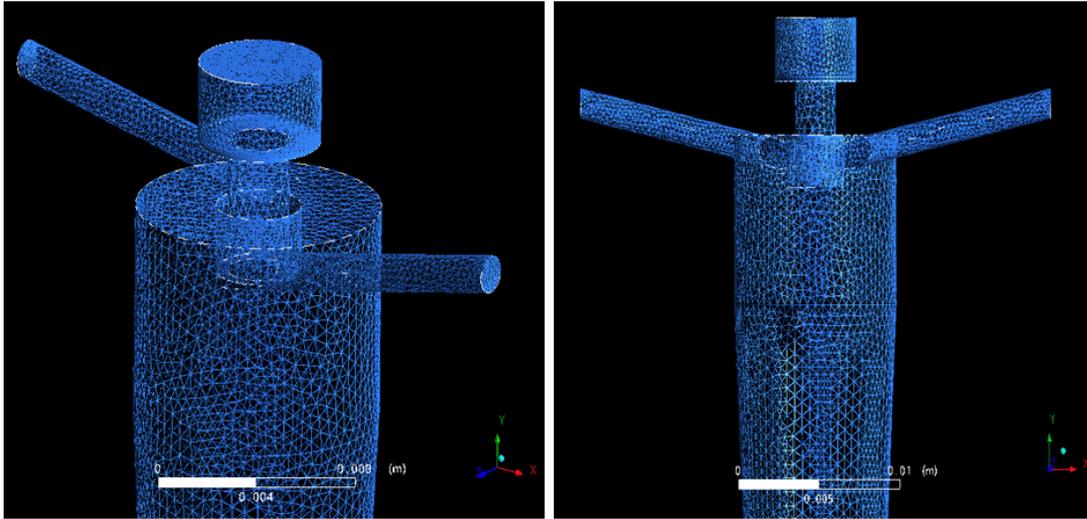


Figura 4.8 – Malha superficial da Geometria 3.

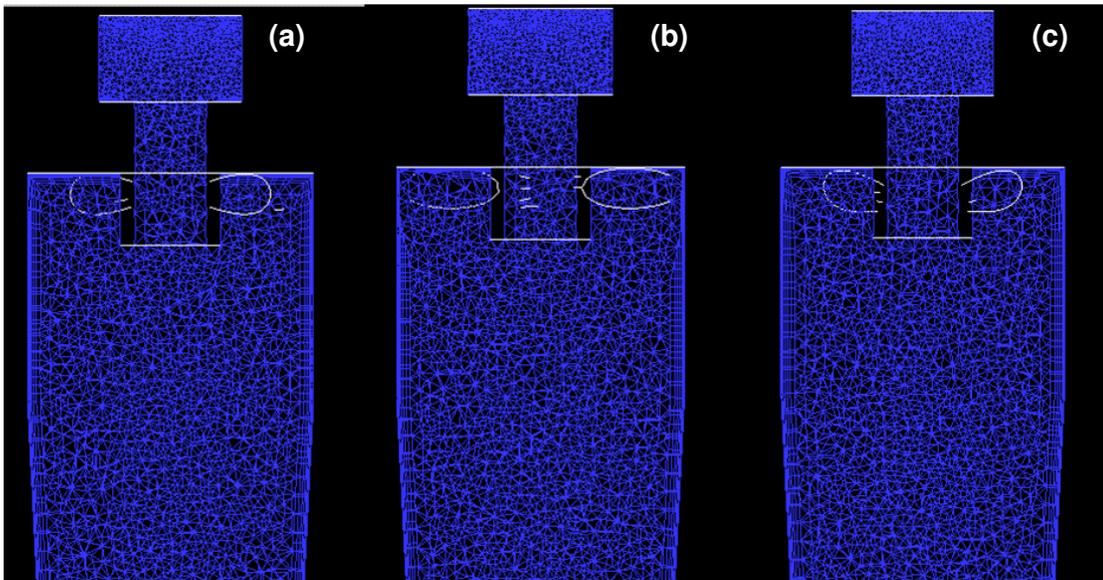


Figura 4.9 – Corte da malha volumétrica. Geometria 1 (a), Geometria 2 (b) e Geometria 3 (c).

4.3. Pré-processamento

O pré-processamento consiste basicamente na etapa de inserção das condições de contorno e condições iniciais pertinentes ao fenômeno físico.

O CFX 11.0 permite a classificação das condições de contorno do domínio em cinco categorias: entrada (*inlet*), saída (*outlet*), abertura (*opening*), parede (*wall*) e simetria (*symmetry*). Nos hidrociclones em estudo existem paredes, duas entradas e duas aberturas. Estas últimas, apesar de serem as responsáveis pela retirada de fluidos e sólidos não podem ser caracterizadas como saídas, pois o escape de fluido deve ser resultado dos fenômenos internos ao hidrociclone, e não de um ajuste prévio das condições de retirada.

4.3.1. Modelagem Monofásica

O fluido e a temperatura selecionados para a simulação são exibidos a seguir:

Fluido:	Água
Temperatura:	25 °C

4.3.2. Condições de contorno

As condições de contorno para os hidrociclones simulados foram baseadas em testes experimentais realizados pelo grupo do Professor Ricardo Medronho da UFRJ com o hidrociclone análogo à Geometria 1. Os resultados destes testes não foram publicados e são de propriedade do grupo.

Entrada:	Velocidade Normal = 7,62 m/s
Overflow:	<i>Opening</i> , Pressão relativa = 0 Pa
Underflow:	<i>Opening</i> , Pressão relativa = 0 Pa
Paredes:	Condição de não deslizamento nas paredes (<i>no slip</i>)
Consideração da influência do empuxo (<i>Buoyance Model</i> ativado)	
Modelo de Turbulência = $k-\epsilon$ (para o teste de malhas)	
SSG (<i>Reynolds Stress Model</i> – para simulações transientes)	

4.3.3. Parâmetros para simulação transiente

A seguir estão listadas as condições iniciais utilizadas nas simulações transientes. O passo de tempo foi ajustado para ser adaptativo, com base no número de Courant médio (RMS). O número de Courant relaciona aspectos da malha (como distância entre nós), passo de tempo e características do escoamento (no caso a velocidade do fluido).

Tempo inicial = 0 s

Tempo total = 1,5 s

Passo de tempo inicial = $5 \cdot 10^{-5}$ s

Frequência de ajuste do passo de tempo = 10

Número de Courant RMS = 1

Máximo passo de tempo = $1 \cdot 10^{-3}$ s

Mínimo passo de tempo = $1 \cdot 10^{-4}$ s

Condição Inicial:

Velocidades: $u = 0$ m/s; $v = 0$ m/s; $w = 0$ m/s (Geometrias 1 e 2)

Resultado de simulação com modelo $k-\epsilon$ (Geometria 3)

Pressão: 0 Pa

4.4. Parâmetros de Solução (Solver)

A seguir estão ilustrados os parâmetros ajustados no módulo de solução das equações do CFX 11.0 (Solver)

Método de interpolação: “*High Resolution*”

Número máximo de “*Coefficient Loops*”: 5

Controle da escala de tempo: “*Coefficient Loops*”

Critério de convergência:

Resíduo requerido: $1 \cdot 10^{-4}$

Tipo de resíduo requerido:MAX (máximo)

Todas as simulações foram executadas em um único computador com processador Core 2 Duo, 1,8 GHz, com 2 Gb de memória RAM.

O esforço computacional exigido pelas simulações foi grande. O teste de malhas foi realizado com simulações que duraram de 1 a 3 dias cada. Estas simulações foram realizadas utilizando um único processador e apenas 1Gb de memória RAM. Já as simulações transientes duraram cerca de duas semanas cada uma, utilizando dois processadores em paralelo e 2 Gb de memória RAM.

4.5. Pós-processamento

Utilizou-se o módulo CFX-Post do software CFX 11.0 para a visualização dos resultados. Estes serão discutidos a seguir no Capítulo 5.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1. Caracterização do escoamento

O perfil de velocidades tangenciais dos três hidrociclones estudados foi analisado com o intuito de ter uma idéia se o escoamento estava bem caracterizado, ou seja, de que as simulações estavam convergindo para uma solução realista. Assim, as simulações realizadas, como citado anteriormente, foram transientes. Isto possibilitou uma análise temporal do estabelecimento destes perfis. Neste sentido, a única exceção foi a Geometria 3. Como para sua simulação houve problemas de convergência utilizando o modelo de turbulência dos tensores de Reynolds, fez-se necessário uma primeira simulação transiente, utilizando o modelo $k-\epsilon$, para obter um resultado que fosse utilizado como condição inicial na simulação posterior. Deste modo, como a condição inicial da Geometria 3 não foi a de fluido estático, a evolução de seu perfil de velocidades tangenciais não permite comparação com as demais. Vale ressaltar que as simulações não foram levadas até o tempo final estipulado no pré-processamento, pois atingiram o estado estacionário em tempos anteriores. Das figuras 5.1 a 5.7, são ilustrados os resultados para os perfis de velocidade tangencial das 3 geometrias analisadas e as linhas nas quais estes resultados foram coletados. Escolheu-se uma linha na região cônica e outra na região de transição cilindro-cone para se avaliar as diferenças impostas ao escoamento pelas diferentes estruturas.

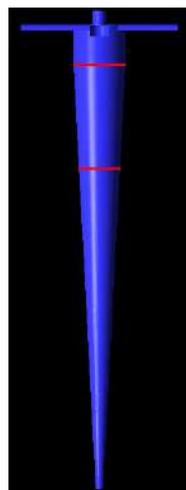


Figura 5.1 – Ilustração das linhas-base para coleta de dados de velocidade tangencial.

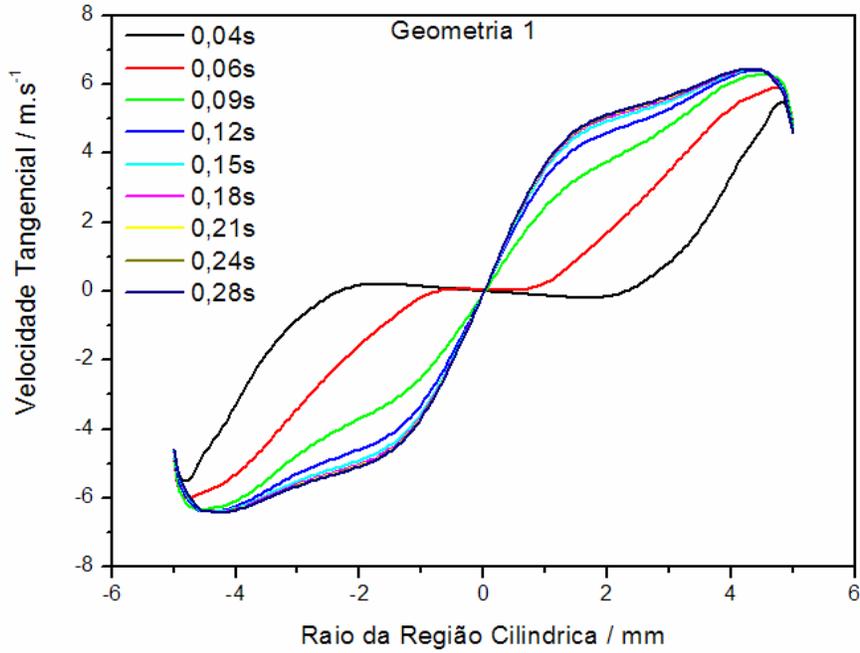


Figura 5.2 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cilíndrica da Geometria 1.

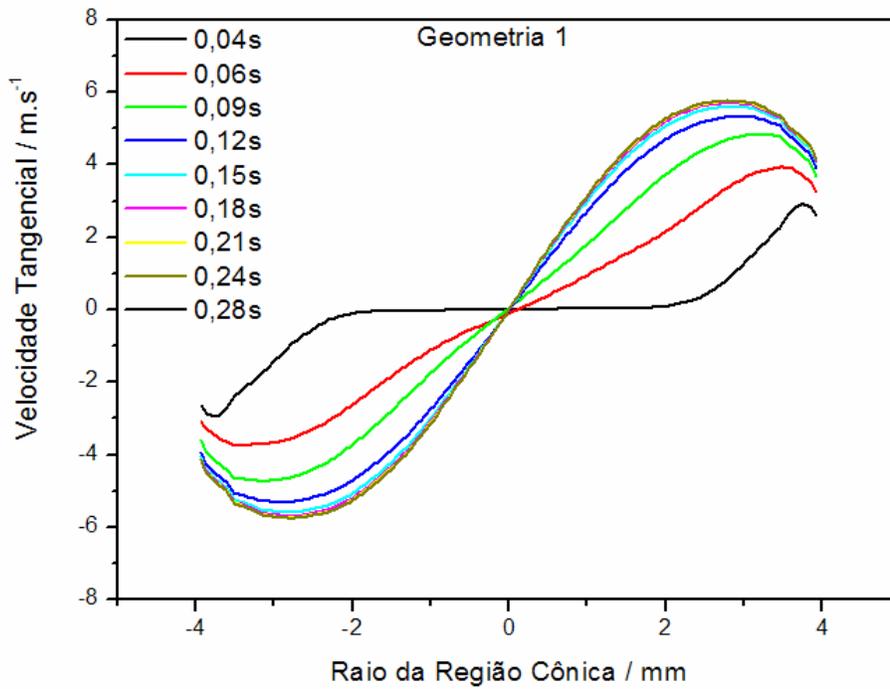


Figura 5.3 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cônica da Geometria 1.

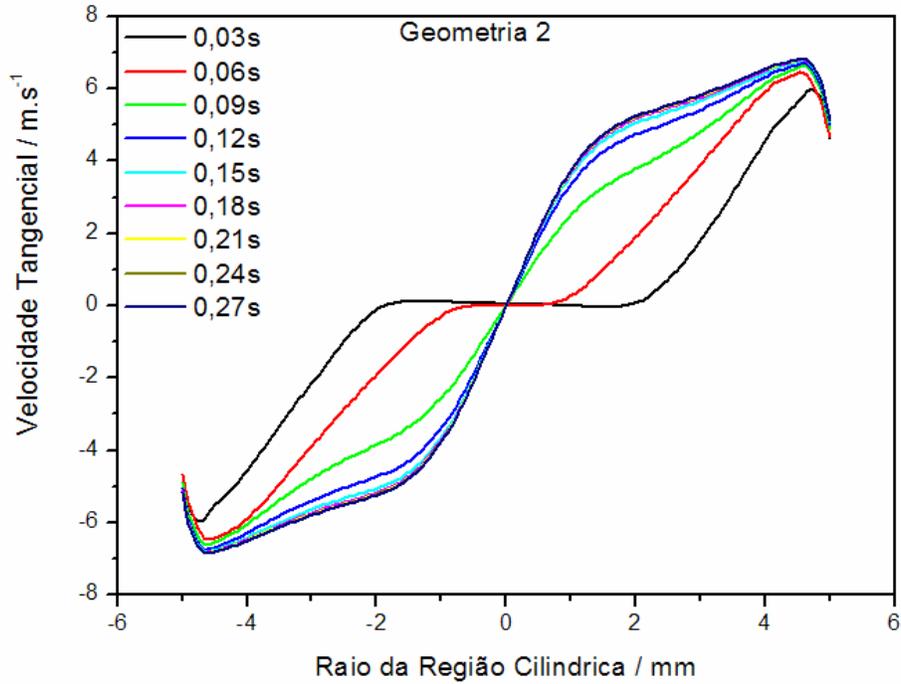


Figura 5.4 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cilíndrica da Geometria 2.

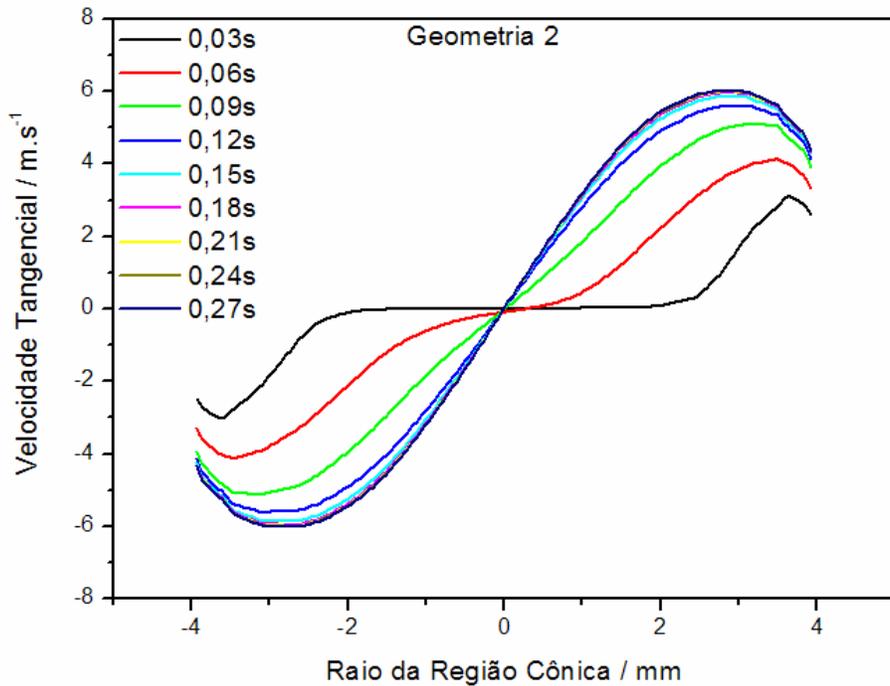


Figura 5.5 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cônica da Geometria 2.

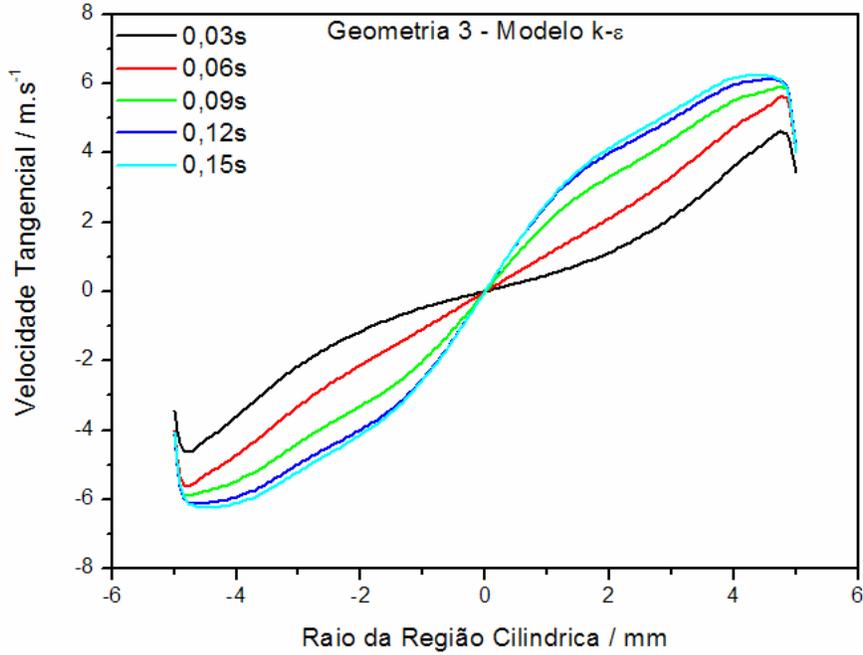


Figura 5.6 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cilíndrica da Geometria 3 utilizando modelo de turbulência k-ε.

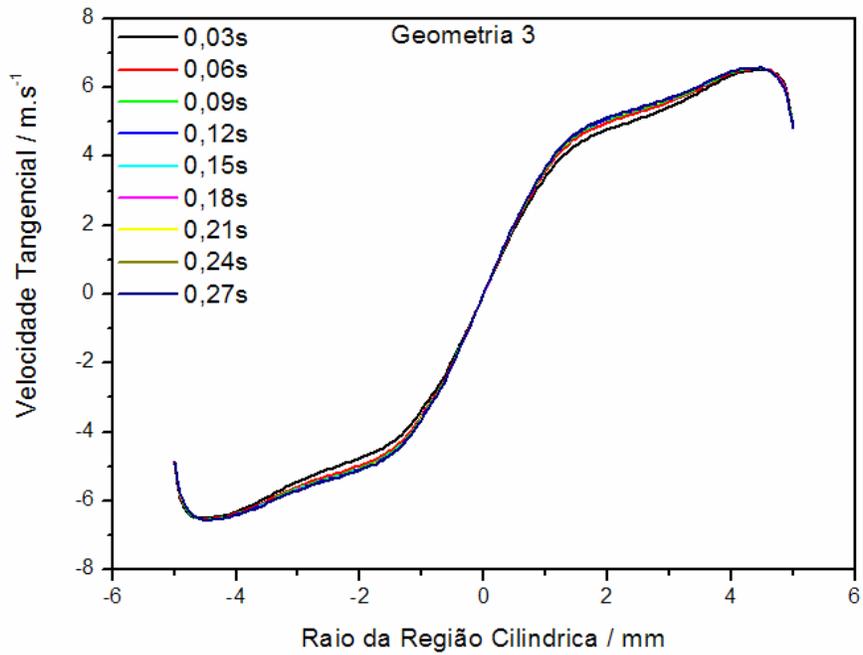


Figura 5.7 – Gráfico da evolução temporal do perfil de velocidades tangenciais na região cilíndrica da Geometria 3 utilizando modelo de turbulência SSG.

Pelos gráficos anteriores, pode-se afirmar que o tempo requerido para que os hidrociclones entrem em estado estacionário é de aproximadamente 0,15 s. Comparando-se com o tempo de residência de cada hidrociclone, exibido na tabela 5.1, pode-se notar que o mesmo é bem superior ao tempo de residência de cada geometria.

Tabela 5.1 – Tempos de residência de cada geometria simulada.

	Geometria 1	Geometria 2	Geometria 3
Volume (m³)	1,87E-09	2,72E-09	2,09E-09
Vazão Volumétrica (m³/s)	2,32E-05	2,32E-05	2,32E-05
Tempo de Residência (s)	8,03E-05	1,17E-04	8,98E-05

O perfil de velocidades tangenciais observado para as três geometrias tem seu pico de velocidade um pouco deslocado em relação ao que se exhibe na Figura 2.1, na qual a velocidade máxima se localiza mais próxima ao eixo central. De acordo com os resultados obtidos neste trabalho, as velocidades tangenciais no vórtice interno ascendente são inferiores às do vórtice externo descendente. Pode-se afirmar que esta conclusão é verdadeira uma vez que os hidrociclones estudados operam com uma razão de fluido R_f igual a 27,8% (Geometrias 1 e 2), e 29% (Geometria 3) (valor encontrado nas simulações). Valores estes superiores aos encontrados em hidrociclones convencionais, onde a fração de fluido que escapa pelo *underflow* (R_f) não ultrapassa, normalmente, 20%. Assim, no hidrociclone estudado, uma parte maior do fluido deixa o equipamento pelo *underflow*, ao contrário dos hidrociclones convencionais, o que justifica encontrarem-se aí as maiores velocidades tangenciais. Uma análise das velocidades axiais torna os resultados um pouco mais claros (figura 5.8). Observam-se através destas velocidades que o vórtice interno ainda

detém velocidades axiais superiores às do vórtice externo, justificando o fato de a razão de fluido não ser tão superior às normalmente observadas.

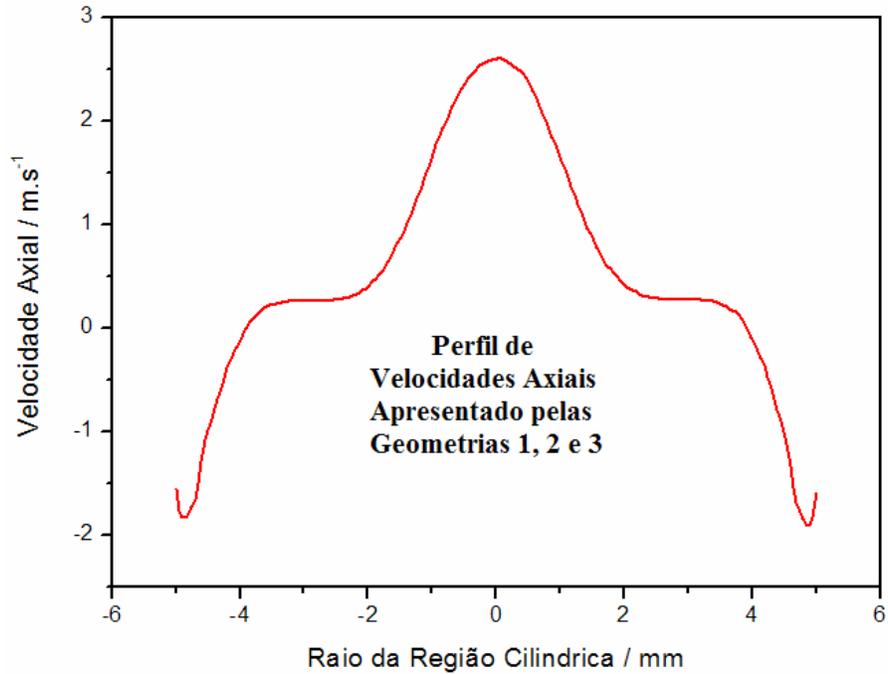


Figura 5.8 –Perfil de velocidades axiais obtido pelas simulações das geometrias estudadas.

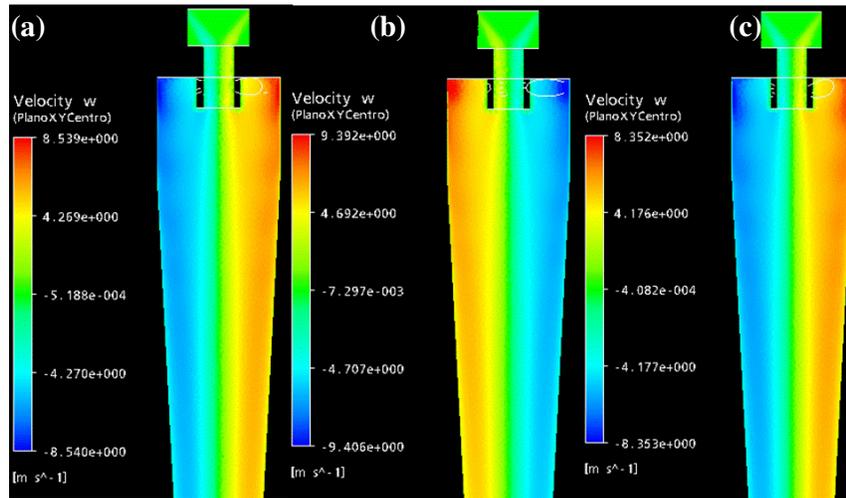
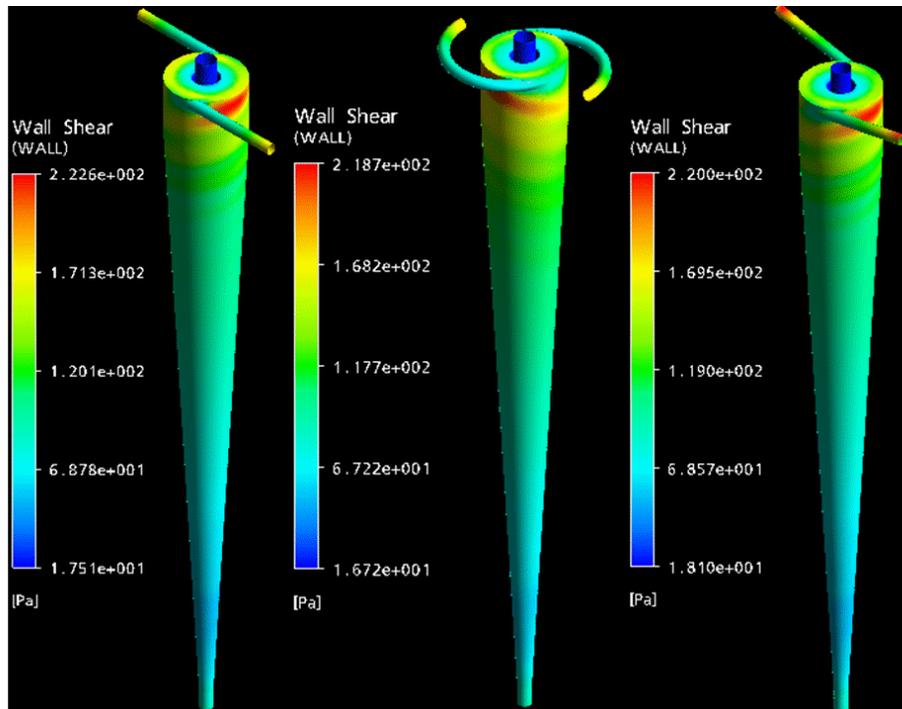


Figura 5.9 – Perfil de velocidades tangenciais ao longo de um plano longitudinal às geometrias para: (a) Geometria 1, (b) Geometria 2 e (c) Geometria 3.

Visto que são nas paredes que ocorrem as maiores tensões cisalhantes, optou-se por focar as análises relativas às tensões apenas nestas regiões. As figuras a seguir ilustram o perfil das tensões sobre as paredes dos equipamentos. A figura 5.10 exhibe os valores reais das tensões simuladas, enquanto que a figura 5.11 utiliza valores especificados para as tensões máximas e mínimas. Estes valores especificados foram utilizados para uma comparação entre a área de exposição das células às maiores tensões cisalhantes.



– Figura 5.10 Perfil de tensão cisalhante sobre as paredes dos hidrociclone para (a) Geometria 1, (b) Geometria 2 e (c) Geometria 3.

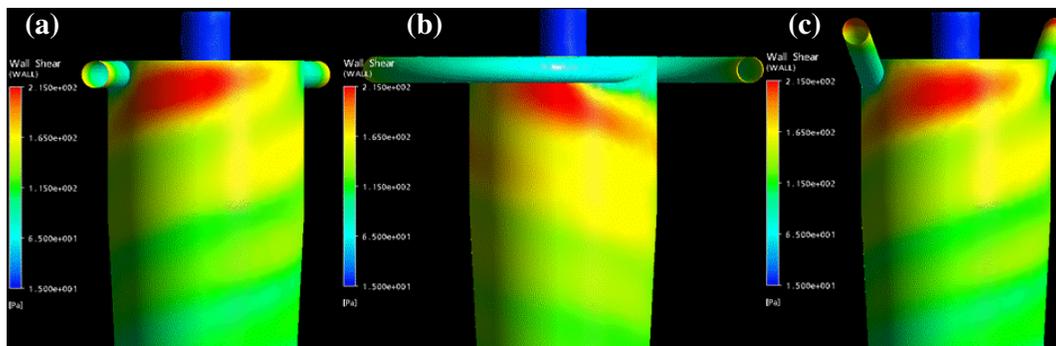


Figura 5.11 – Perfil ampliado de tensão cisalhante sobre as paredes dos hidrociclone para (a) Geometria 1, (b) Geometria 2 e (c) Geometria 3.

Em todos os casos observa-se uma tensão cisalhante maior próximo às entradas dos equipamentos. As duas geometrias propostas apresentaram uma diminuição muito pequena nas tensões cisalhantes. A Geometria 2 apresentou uma queda de 2% (de 222,6 Pa para 218,7 Pa) e a Geometria 3 apenas 1% (de 222,6 Pa para 220,0 Pa). Ou seja, o aumento da complexidade na construção do hidrociclone para as duas geometrias propostas não se justifica

pelos baixos ganhos em redução de tensão. No entanto, a geometria que parece ser a mais promissora é a Geometria 2. A área em vermelho nesta é menor do que a exibida nas outras duas geometrias, indicando que as células ficariam sob as maiores tensões em regiões menores e conseqüentemente por um tempo menor. A Geometria 3, apesar de também apresentar uma queda na tensão de cisalhamento, não aparenta visualmente ter uma redução da área vermelha quando comparada à Geometria 1. A transição a outros níveis de tensão é mais suave na Geometria 2, o que pode ser observado pela extensão da área em amarelo. Isto significa que, nesta geometria, as células ficam expostas às tensões intermediárias por um tempo maior.

6. CONCLUSÕES

O estudo realizado para obter-se o refinamento ideal da malha mostrou ser necessário trabalhar-se com malhas com um número de nós superior a 600.000, a fim de reproduzir, com fidelidade, o escoamento no interior do hidrociclone estudado. Isto exigiria, entretanto, um poder computacional não disponível no laboratório, durante o período de realização deste trabalho. Desta forma, os resultados obtidos tiveram que ser analisados de forma qualitativa.

O objetivo inicialmente proposto de se estudar modificações na forma como a alimentação é introduzida no hidrociclone, visando a uma diminuição na tensão de cisalhamento, pode ser considerado alcançado.

As três geometrias estudadas não apresentaram, entre si, uma diminuição significativa nos níveis de tensão de cisalhamento. Comparando-se a tensão de cisalhamento máxima gerada pela Geometria 1 (geometria convencional) com as geradas pelas Geometrias 2 e 3, verificou-se uma queda de apenas 2% e 1%, respectivamente, nas tensões de cisalhamento. Entretanto, os resultados mostraram que, na Geometria 2, as células ficariam sob as maiores tensões em áreas menores que as da Geometria 1, logo, o tempo de exposição a estas maiores tensões seria menor. Entretanto, ficam expostas mais tempo às tensões de valor intermediário.

A Geometria 3, apesar de também apresentar uma pequena diminuição nos valores de tensão cisalhante quando comparado à Geometria 1, exibe um perfil diferente ao apresentado pela Geometria 2, isto é, a área de exposição às maiores tensões não apresenta mudança significativa.

6.1. Sugestões para trabalhos futuros

Face ao maior poder computacional sendo instalado, no momento, no LAB CFD da Escola de Química/UFRJ, sugere-se um estudo dos sistemas abordados neste trabalho com uma malha mais refinada, visando concluir se este fator está ou não afetando os resultados numéricos aqui obtidos.

Seria interessante realizar-se um estudo mais amplo acerca da Geometria 2. A introdução de pequenas modificações, como variações no

diâmetro e na inclinação da entrada, pode trazer, diminuições mais expressivas na tensão de cisalhamento que as encontrados neste trabalho.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANSYS CFX, 2007. CFX-11 Solver theory. ANSYS INC., Canonsburg, USA.
- BARREIRA, M. N., FILHO, R. M., 2003, “Introdução a modelagem 3D para reatores air-lift empregando o “Método dos Volumes Finitos” na resolução da fluidodinâmica (CFD)”, Universidade Estadual de Campinas, Campinas.
- BATT, B.C., DAVIS, R.H., KOMPALA D.S. (1990), “Inclined sedimentation for selective retention of viable hybridomas in a continuous suspension bioreactor”, *Biotechnology Progress*, v. 6, p. 458-464.
- BIRD, R.B.; STEWART, W.E.; LIGHTFOOT, E.N (2002). “*Transport Phenomena*”. 2ªed. John Wiley & Sons, Inc.
- CASTILHO, L. & MEDRONHO, R.A., 2007, “Animal Cell Separation”, In: Castilho, L.R., Augusto, E.F, Moraes, A.M e Butler, M. (eds), *Animal Cell Technology: from Biopharmaceuticals to Gene Therapy*, Taylor & Francis, Andover (na prensa).
- CASTILHO, L., MEDRONHO, R.A., 2002, “Cell retention devices for suspended-cell perfusion cultures”, *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, v. 74, pp. 129 169.
- DOBLHOFF-DIER, O., GAIDA, T., KATINGER, H., 1994, “A novel ultrasonic resonance field device for the retention of animal-cells”, *Biotechnology Progress*, v. 10, pp. 428–432.
- FONTES, C.E., SILVA, L.F.L.R., LAGE, P.L.C., RODRIGUES, R.C. (2005), “Introdução a Fluidodinâmica Computacional”. *Escola Piloto Virtual*, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- GAIDA, T., DOBLHOFF-DIER, O., STRUTZENBERGER, K., et al., 1996, “Selective retention of viable cells in ultrasonic resonance field devices”, *Biotechnology Progress*, v. 12, pp. 73–76.
- JÄGER, V., 1992, “A novel perfusion system for the large-scale cultivation of animal cells based on a continuous flow centrifuge”. In: SPIER, R.E.; GRIFFITHS, J.B.; MACDONALD, C. (eds.), *Animal cell technology:developments, processes and products.*, pp. 397-402, Butterworth-Heinemann, Oxford.

- KAWAHARA, H., MITSUDA, S., KUMAZAWA, E., *et al.*, 1994, "High-density culture of FM-3A cells using a bioreactor with an external tangential-flow filtration device", *Cytotechnology*, v. 14, p. 61-66.
- KRETZMER, G. 2002, "Industrial processes with animal cells", *Applied Microbiology Biotechnology*, v. 59, pp. 135-142.
- LÜBBERSTEDT, M., MEDRONHO, R.A., ANSPACH, F.B., 2000a, "Separation of mammalian cells using hydrocyclones", In: Proceedings of Biotechnology, Dechema eV, Frankfurt am Main, v. 1, p. 460-462.
- LÜBBERSTEDT, M., MEDRONHO, R.A., ANSPACH, F.B., *et al.*, 2000b "Abtrennung tierischer Zellen mit Hydrozyklonen", *Chemical Engineering & Technology*, v. 72, p. 1089-1090.
- MAIORELLA, B., DORIN, G., CARION, A., *et al.*, 1991, "Crossflow microfiltration of animal cells", *Biotechnology and Bioengineering*, v. 37, pp. 121–126.
- MALISKA, C.R (2004). "*Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*". 2ª ed. LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A. Rio de Janeiro.
- MASSARANI, G (2002). "*Fluidodinâmica em Sistemas Particulados*". 2ª ed. E-Papers Serviços Editoriais. Rio de Janeiro.
- MEDRONHO, R.A., SCHUETZE, J., DECKWER, W.-D., 2005, "Numerical simulation of hydrocyclones for cell separation", *Latin American Applied Research*, v. 35, pp.1-8.
- NETO, A. S., Laboratório de Transferência de Calor e Massa, LTCM, Universidade Federal de Uberlândia.
- PINTO, R. C. V., MEDRONHO, R.A., CASTILHO, L., 2007, "Estudo do emprego de hidrociclones na separação de células animais". Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- PUI, P.W.S., TRAMPLER, F., SONDERHOFF, S.A., *et al.*, 1995, "Batch and semicontinuous aggregation and sedimentation of hybridoma cells by acoustic-resonance fields", *Biotechnology Progress*, v. 11, pp. 146–152.

- SILVA, M. K., QUADRI, M. B., MACHADO, R. A. F., “*Estudo de Modelagem Numérica Tridimensional de Ciclones do Tipo Lapple para Separação Gás-Sólido*”. Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, 2006.
- SVAROVSKY, L. (2000). “Solid-Liquid Separation”. 4^a ed. Butterworth Heinemann, Oxford.
- TOKASHIKI, M., ARAI, T., HAMAMOTO, K., et al., 1990, “High density culture of hybridoma cells using a perfusion culture vessel with an external centrifuge”, *Cytotechnology*, v. 3, pp. 239–244.
- VAN REIS, R., SYDNEY, A., 2001, “Membrane separations in biotechnology”, *Current Opinion in Biotechnology*, v. 12, pp. 208-211.
- VERSTEEG, H.K., MALALASEKERA, W., “*An introduction to Computational Fluid Dynamics (The Finite Volume Method)*”. Prentice Hall ,1995.
- VOISARD, D., MEUWLY, F., RUFFIEUX, P.A., et al., 2003, “Potential cell retention techniques for large-scale high-density perfusion ceulture of suspended mammalian cells”, *Biotechnology and Bioengineering*, v. 92, pp. 752-765.
- WOODSIDE, S.M., BOWEN, B.D., PIRET, J.M., 1998, “Mammalian cell retention devices for stirred perfusion bioreactors”, *Cytotechnology*, v. 28, pp. 163-175.