

УДК 62-69

Анатичук Л.І., акад. НАН України^{1,2}
Кобилянський Р.Р., канд. фіз.-мат. наук^{1,2}
Лисько В.В., канд. фіз.-мат. наук^{1,2}

¹Інститут термоелектрики НАН та МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна;

²Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського 2, Чернівці, 58012, Україна
e-mail: anatych@gmail.com

КОМП'ЮТЕРНЕ ПРОЄКТУВАННЯ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО КОНДЕНСАТОРА ЛЕГЕНЕВОГО ПОВІТРЯ ДЛЯ ДІАГНОСТИКИ КОРОНАВІРУСНИХ ТА ІНШИХ ЗАХВОРЮВАНЬ

Розглянуто фізичну модель термоелектричного приладу для збирання конденсату з повітря, що видихається людиною. Шляхом комп'ютерного моделювання визначено розподіли температури та швидкості руху повітря у робочій камері приладу в залежності від температури робочої камери, а також вологості, температури та об'єму видихуваного повітря. Наведено результати розрахунків холодопродуктивності термоелектричних модулів, необхідної для забезпечення заданих режимів роботи приладу. Бібл. 6, рис. 9.

Ключові слова: діагностика, коронавірус, конденсат, видихуване повітря, термоелектричне охолодження.

Вступ

Коронавірусна хвороба COVID-19, спричинена важким гострим респіраторним синдромом коронавірусу SARS-CoV-2, привертає увагу медиків, дослідників, політиків та громад у всьому світі. COVID-19 є третім великим поширенням коронавірусу протягом останніх двох десятиліть, з більшим глобальним впливом, ніж попередні спалахи коронавірусу у 2003 році (SARS-CoV) та 2012–2015 та 2020 роках (MERS-CoV). Передача SARS-CoV-2 могла бути посилена шляхом поширення від осіб з безсимптомним та слабосимптомним перебігом захворювання. Вирішальну роль у подоланні пандемії коронавірусної хвороби COVID-19 відіграє діагностичне тестування. Швидкі та точні діагностичні тести є обов'язковими для виявлення та лікування інфікованих осіб, відстеження контактів, епідеміологічної характеристики, та прийняття рішень у сфері охорони здоров'я.

Сучасне діагностичне тестування на коронавірусну хворобу COVID-19 базується на виявленні коронавірусу SARS-CoV-2 у зразках мазків з носоглотки методом полімеразної ланцюгової реакції зворотної транскрипції (RT-PCR). Однак цей тест пов'язаний з підвищеним ризиком поширення вірусу та забруднення навколишнього середовища і показує відносно низьку чутливість, що пояснюється технічними недоліками методу відбору проб. Враховуючи, що COVID-19 передається через аерозолі та краплі, що видихаються людиною, виявлення SARS-CoV-2 в легеневому конденсаті може служити перспективним неінвазивним

діагностичним методом. Такий метод пропонується у роботах вчених з Японії, США, Ірландії та інших країн як більш чутливий та надійний метод виявлення COVID-19 [1-4]. Зазвичай, для збору конденсату використовуються спеціальні пристрої – конденсатори, у яких пари з повітря, що видихається людиною, конденсуються при температурі від 0 до $-70\text{ }^{\circ}\text{C}$ та збирається у ємність для подальших досліджень методом RT-PCR [5].

Важливим при цьому є забезпечення контрольованої низької температури конденсатора, зручність, невисока вартість та безпечність використання такого приладу. Пониження температури конденсації дозволяє пришвидшити отримання необхідної для досліджень кількості біологічного матеріалу. При цьому робочі температури конденсаторів, у яких використовується лід при $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ або компресорне охолодження до $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$, є недостатньо ефективними та не забезпечують високої швидкості конденсації. Компресорні конденсатори до того ж є складними, дороговартісними, з недостатнім регулюванням і підтримкою робочої температури, а також наявністю небезпечних холодоагентів. Є спроби зробити термоелектричні конденсатори видихуваного повітря, однак можливості термоелектрики у них використані не на максимум (рівень робочих температур до $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$). Температура $-70\text{ }^{\circ}\text{C}$, яка досягається використання сухого льоду (твердого CO_2), є надмірною і вкрай незручною для експлуатації, що радикально зменшує можливості застосування цього методу. Отже, важливим є створення термоелектричного конденсатора з точно регульованими температурами нижчими від $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$ і близькими до $-70\text{ }^{\circ}\text{C}$ без використання сухого льоду.

Метою цієї роботи є комп'ютерне проектування та розробка конструкції термоелектричного конденсатора легеневого повітря для діагностики коронавірусних та інших захворювань.

1. Фізична та комп'ютерна моделі термоелектричного конденсатора легеневого повітря

Термоелектричний прилад для збирання конденсату з повітря, що видихається людиною містить блок охолодження, блок живлення та респіраторний контур. Фізична модель його основного елементу – блоку охолодження, наведена на рис. 1. На рис. 1 зроблено наступні позначення:

G , T_{air} , ϕ_{air} – витрата, температура та відносна вологість повітря, що видихається пацієнтом;

Q_0 – холодопродуктивність термоелектричних модулів;

Q_1 – тепловий потік, що надходить до пробірки для збирання конденсату разом з повітрям, що видихається пацієнтом;

Q_2 – тепловий потік, що відводиться з пробірки у оточуюче середовище;

Q_3 – теплота, що виділяється у пробірці при конденсації парів видихуваного повітря;

Q_4 – тепловий потік, що передається від стінок пробірки до камери охолодження;

Q_5 – натікання тепла до пробірки з оточуючого середовища через теплову ізоляцію;

Q_6 – натікання тепла до пробірки з повітряних теплообмінників через теплову ізоляцію;

Q_7 – тепловий потік, що відводиться з повітряних теплообмінників у оточуюче середовище;

T_1 – температура стінок пробірки;

T_c – температура холодної сторони термоелектричного модуля;

T_h – температура гарячої сторони термоелектричного модуля;

T_2 – температура повітряних теплообмінників;

T_0 – температура оточуючого середовища (корпусу приладу).

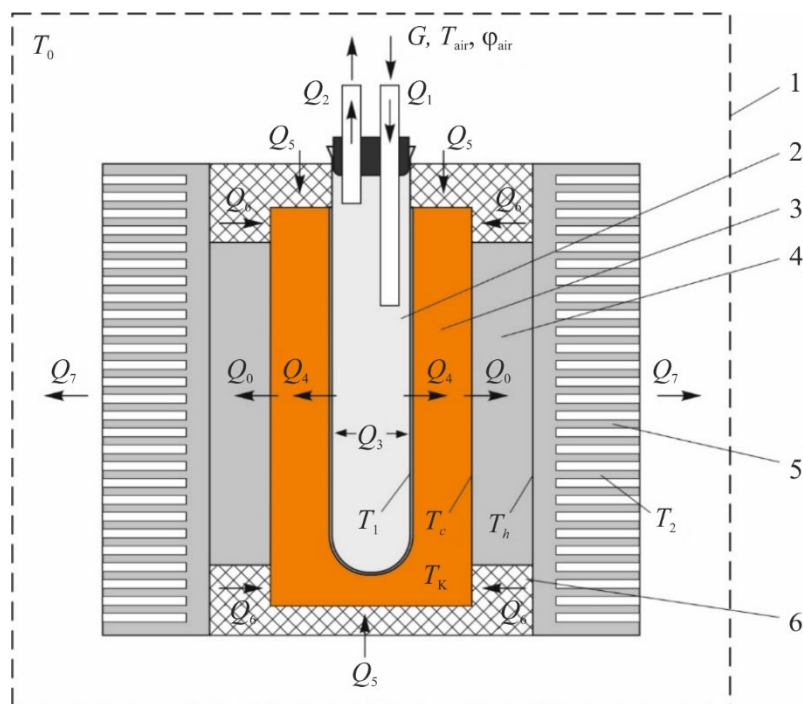


Рис. 1. Фізична модель блоку охолодження термоелектричного приладу для збирання конденсату з повітря, що видихається людиною: 1 – термостат (корпус приладу); 2 – пробірка для збирання конденсату; 3 – робоча камера; 4 – термоелектричні модулі; 5 – повітряні теплообмінники; 6 – теплова ізоляція.

Комп'ютерна модель приладу була побудована за допомогою пакету прикладних програм Comsol Multiphysics. При цьому використано наступні модулі програми.

1. *Turbulent Flow*. Дозволяє моделювати турбулентний потік, використовуючи широкий спектр моделей турбулентності, а також симуляцію великих вихрів (LES) і моделювання відокремлених вихрів (DES). Вісім моделей турбулентності відрізняються тим, як вони моделюють потік поблизу стінок, кількістю додаткових змінних, які розраховуються, і тим, що ці змінні представляють. Усі ці моделі доповнюють рівняння Нав'є-Стокса додатковим членом вихрової в'язкості турбулентності, але вони відрізняються способом його обчислення.

2. *Heat Transfer in Solids*. Дозволяє розв'язувати рівняння

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u}_{\text{trans}} \cdot \nabla T \right) + \nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_r) = -\alpha T \frac{dS}{dt} + Q$$

де:

- ρ – густина (одиниця СІ: $\text{кг}/\text{м}^3$);
- C_p – питома теплоємність при постійному тиску (одиниця СІ: $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$);
- T – абсолютна температура (одиниця СІ: К);
- $\mathbf{u}_{\text{trans}}$ – вектор швидкості поступального руху (одиниця СІ: $\text{м}/\text{с}$);
- $\mathbf{q}$ – тепловий потік теплопровідністю (одиниця СІ: $\text{Вт}/\text{м}^2$);
- $\mathbf{q}_r$ – тепловий потік випромінюванням (одиниця СІ: $\text{Вт}/\text{м}^2$);

- α – коефіцієнт теплового розширення (одиниця СІ: 1/К);
- S – другий тензор напруг Піола-Кірхгофа (одиниця СІ: Па);
- Q містить додаткові джерела тепла (одиниця СІ: Вт/м³).

Для стаціонарної задачі температура не змінюється з часом і умовами з часом похідні зникають.

3. *Moisture Transfer in Air*. Інтерфейс переносу вологи в повітрі розв'язує рівняння

$$M_v \frac{\partial c_v}{\partial t} + M_v \mathbf{u} \cdot \nabla c_v + \nabla \cdot \mathbf{g} = G$$

в якому зміна вмісту вологи виражається через перенос концентрації пари, яка сама по собі може бути виражена як добуток молярної маси води, відносної вологості та концентрації насичення пари:

$$\mathbf{g} = -M_v D \nabla c_v$$

$$c_v = \phi c_{\text{sat}}$$

з наступними властивостями матеріалу, полями та джерелом:

- M_v (одиниця СІ: кг/моль) – молярна маса водяної пари;
- ϕ (безрозмірна) – відносна вологість;
- c_{sat} (одиниця СІ: моль/м³) – концентрація насичення пари;
- D (одиниця СІ: м²/с) – коефіцієнт дифузії пари в повітрі;
- $\mathbf{u}$ (одиниця СІ: м/с) – поле швидкості повітря;
- G (одиниця СІ: кг/(м³·с)) – джерело вологи (або поглинач).

Перенесення концентрації пари відбувається шляхом конвекції та дифузії у вологому повітрі. Вважається, що волога складається лише з пари. Іншими словами, концентрація рідини дорівнює нулю.

4. *Heat Transfer in Moist Air*. Використовується для моделювання теплопередачі у вологому повітрі шляхом конвекції та дифузії за допомогою термодинамічних властивостей, визначених як функція кількості пари у вологому повітрі.

5. *Multiphysics. Nonisothermal Flow*. Неізотермічний потік відноситься до потоків рідини з непостійними температурами. Коли рідина піддається зміні температури, її властивості матеріалу, такі як густина і в'язкість, відповідно змінюються. У деяких ситуаціях ці зміни досить значні, щоб мати істотний вплив на поле потоку. А оскільки рідина переносить тепло, на температурне поле, у свою чергу, впливають зміни в полі потоку.

6. *Multiphysics. Moisture Flow*. Мультифізичний зв'язок Moisture Flow використовується, щоб моделювати потоки рідини, де властивості рідини (густина, в'язкість) залежать від вмісту вологи. Інтерфейс Moisture Flow дозволяє зберегти концентрацію пари, масу та імпульс у повітрі. Він синхронізує функції інтерфейсів транспортування вологи та потоку рідини, коли визначено режим турбулентного потоку.

7. *Multiphysics. Heat and Moisture*. Цей мультифізичний зв'язок використовується для того, щоб змоделювати пов'язану тепло- та вологообмінний процеси в різних середовищах, у тому числі у вологому повітрі шляхом моделювання переносу вологи шляхом дифузії пари та конвекції та теплопередачі шляхом провідності та конвекції. Термодинамічні властивості

вологого повітря залежать від вмісту вологи, тоді як температура використовується для визначення умов насичення для концентрації пари. Цей модуль синхронізує функції інтерфейсів теплопередачі та транспортування вологи:

- визначає відносну вологість ϕ_w (з відповідною температурою та тиском), щоб налаштувати відповідні вхідні дані у функції «Вологе повітря» інтерфейсу теплопередачі;
- визначає температуру для встановлення вхідних даних моделі в функціях інтерфейсу транспортування вологи;
- обчислює джерело прихованого тепла через потоки випаровування та конденсації на поверхнях і додає його в рівняння теплопередачі.

Геометрія робочої камери з пробіркою для збирання конденсату, а також сітка методу кінцевих елементів, що використовується для проведення розрахунків у Comsol Multiphysics наведені на рис. 2.

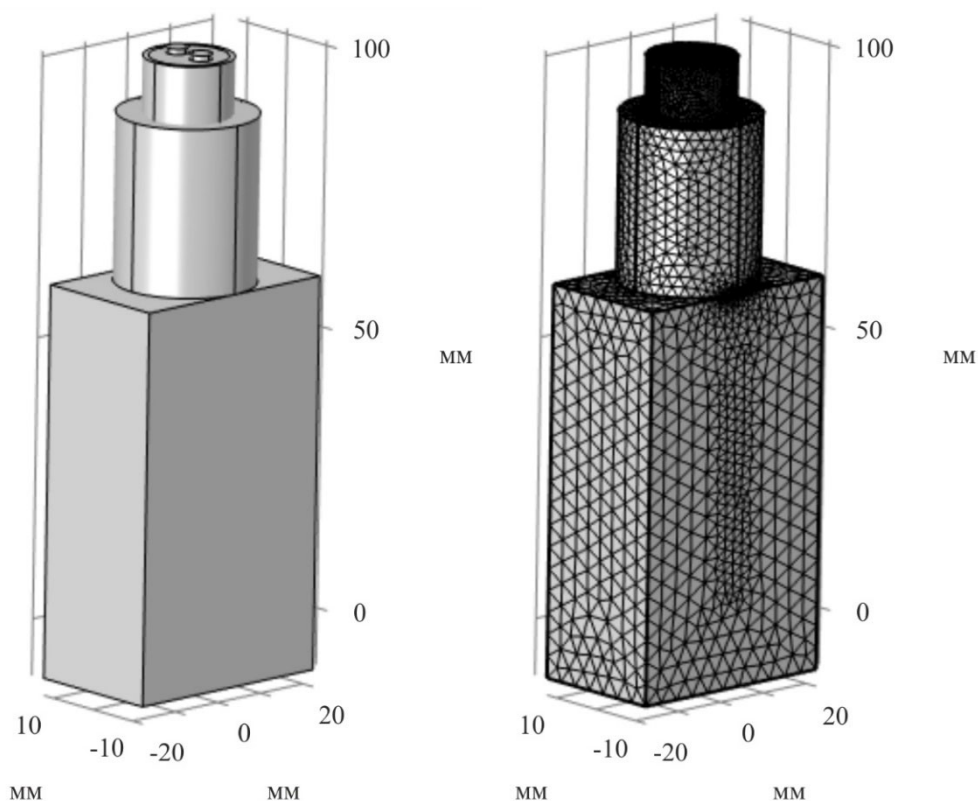


Рис. 2. Комп'ютерна модель термоелектричного приладу для збирання конденсату з повітря, що видихається людиною.

Створена комп'ютерна модель дозволяє розраховувати розподіли температури в робочій камері та пробірці для збирання конденсату з повітря, що видихається людиною, швидкості руху повітря у пробірці та визначати кількість одержуваного конденсату.

2. Результати комп'ютерного моделювання

Використані граничні умови комп'ютерної моделі відповідають фізичній моделі, наведеній на рис. 1. При цьому середній розхід вхідного повітря визначається за кількістю видихів за хвилину та об'єму повітря, що видихається. З літератури відомо, що типова кількість видихів за хвилину знаходиться в межах від 12 до 21. При цьому об'єм повітря, що видихається

рівний 0.3 – 0.7 л. У роботі [6] наведено результати експериментальних досліджень температури та відносної вологості повітря, що видихається: діапазон температур видихуваного повітря становить 31.4 – 35.4 °С для учасників з Хайфи та 31.4 – 34.8 °С для учасників з Парижа, а діапазон відносної вологості видихуваного повітря становить 65.0 – 88.6 % і 41.9 – 91.0 % для Хайфи та Парижа, учасників відповідно. Тобто, температура видихуваного повітря у людей знаходиться в діапазоні 34 – 35 °С, а відносна вологість повітря висока, 90% і вище, незалежно від географічного розташування.

Наведені вище діапазони вхідних параметрів було використано для розрахунків. На рис. 3 показано типові розподіли температури та швидкості руху повітря у робочій камері та пробірці для збирання конденсату. Для наведеного випадку було використано наступні вхідні параметри: температура робочої камери – 263.15 К; температура повітря, що видихається людиною – 306.65 К; вологість видихуваного повітря – 70 %; середня швидкість повітря на вході до пробірки – еквівалента 12 видихам за хвилину з об'ємом повітря 0.31 л.

Комп'ютерна модель дозволяє отримати аналогічні розподіли для інших значень вхідних параметрів, побудувати залежності кількості зібраного конденсату і його температури від цих параметрів, визначити вимоги до термоелектричних модулів та провести оптимізацію конструкції та режимів роботи приладу.

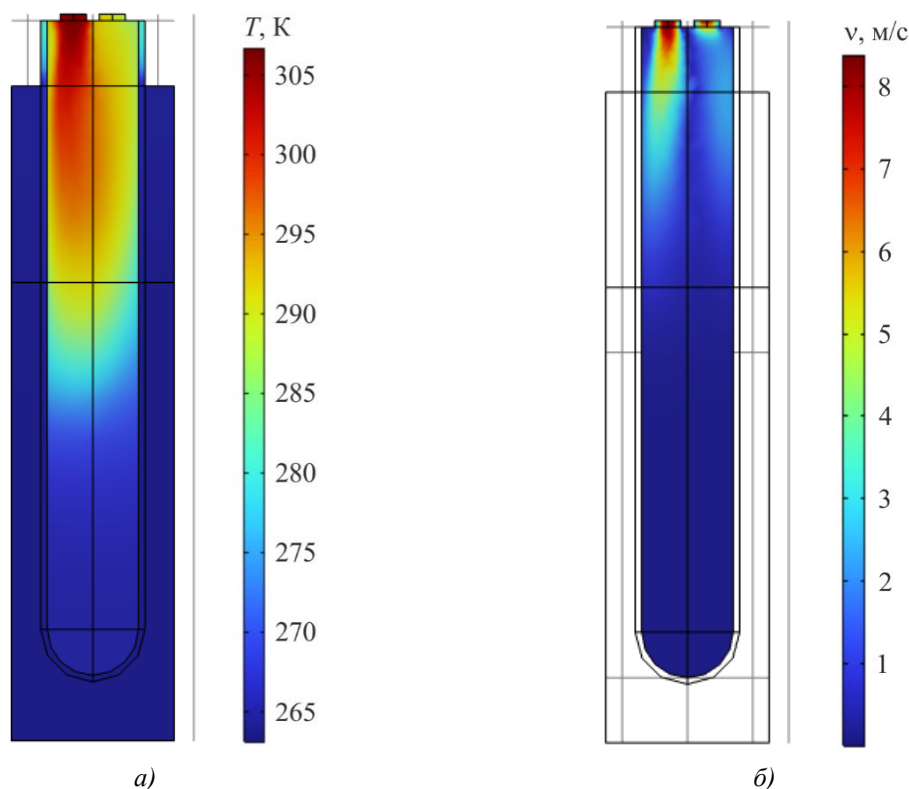


Рис. 3. Типові розподіли температури (а) та швидкості руху повітря (б) в робочій камері приладу для збирання конденсату видихуваного повітря.

На рис. 4, рис.5 наведено приклад результатів комп'ютерних розрахунків швидкості збирання конденсату V_K (у мл за хвилину) та теплової потужності Q_0 , яку необхідно відвести від робочої камери при різних значеннях температури робочої камери T_K , відносної вологості повітря, що видихається ϕ_{air} , температури та витрати видихуваного повітря.

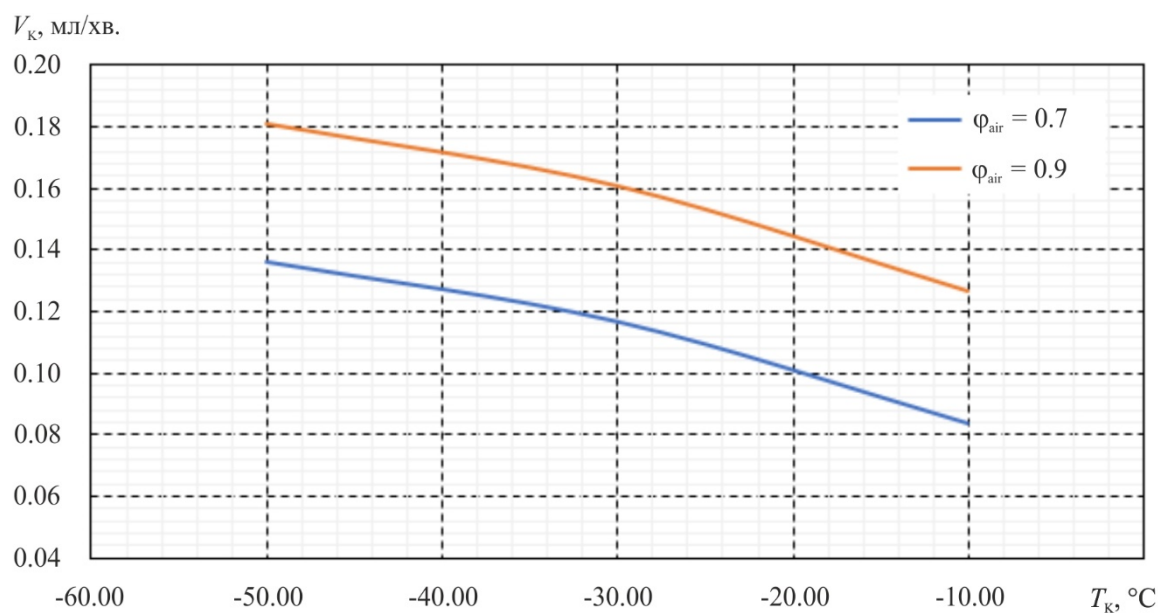


Рис. 4. Залежності швидкості збирання конденсату V_k від температури у робочій камері T_k для різних значень відносної вологості повітря, що видихається (температура видихуваного повітря – 33.5 °C; витрата повітря – еквівалентна 18 видихам за хв. при об'ємі видиху 0.5 л).

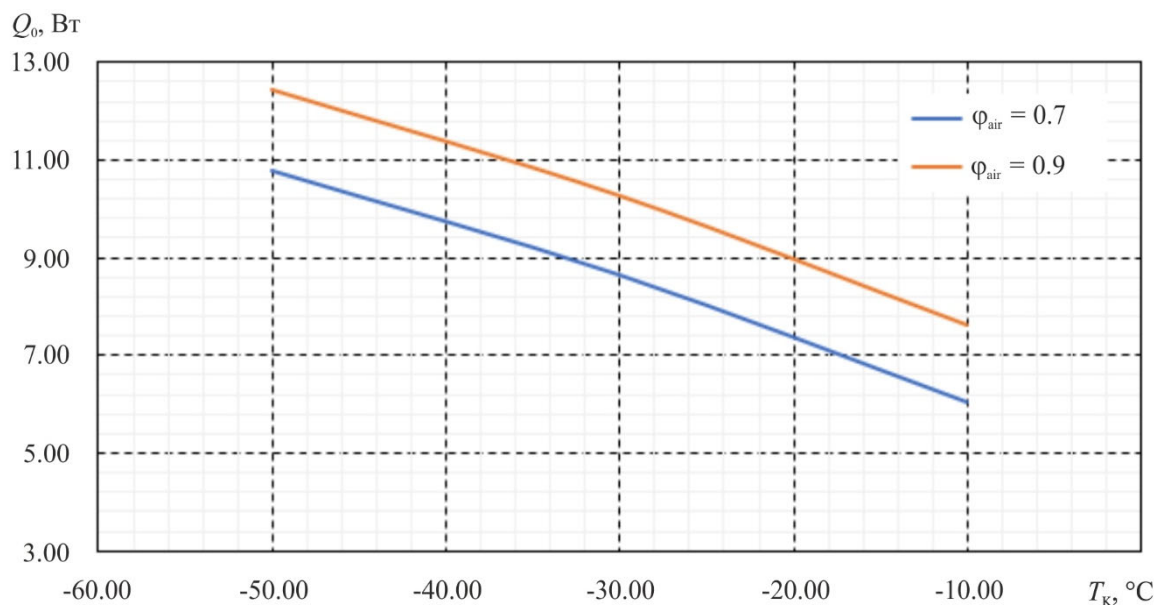


Рис. 5. Залежності теплової потужності Q_0 , яку необхідно відвести від робочої камери, від температури у робочій камері T_k для різних значень відносної вологості повітря, що видихається (температура видихуваного повітря – 33.5 °C; витрата повітря – еквівалентна 18 видихам за хвилину при об'ємі видиху 0.5 л).

На рис. 6 наведено залежність швидкості збирання конденсату V_k від витрати видихуваного повітря G для різних значень температури робочої камери T_k (при температурі видихуваного повітря 33.5 °C та його відносній вологості 90%). Видно, що зниження температури робочої камери від –10°C до –50°C дозволяє підвищити швидкість збирання

конденсату у 1.5 рази. На рис. 7 наведено залежність теплової потужності Q_0 , яку необхідно відвести від робочої камери для забезпечення таких робочих режимів.

V_k , мл/хв.

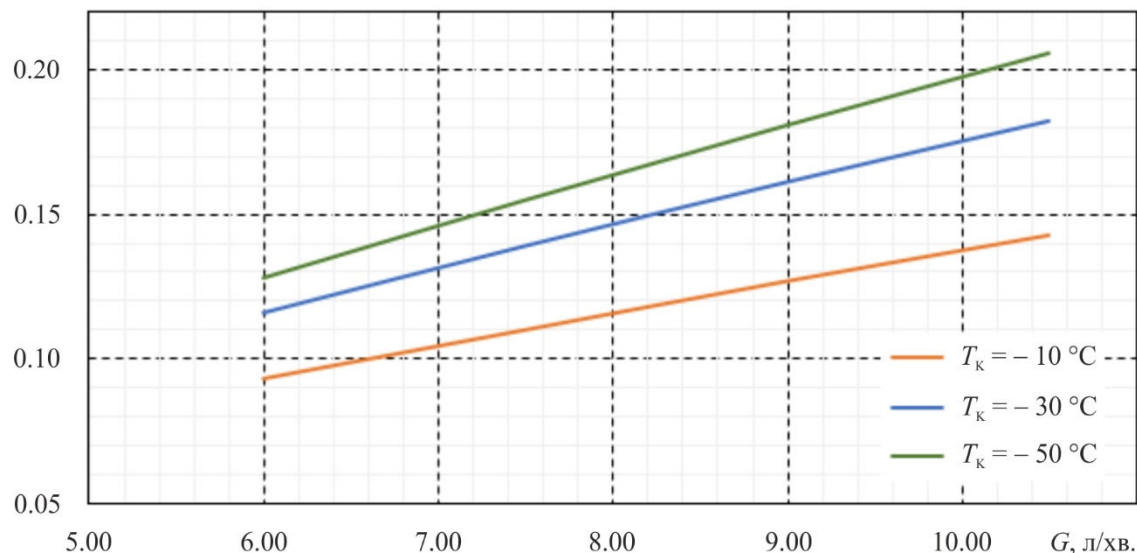


Рис. 6. Залежності швидкості збирання конденсату V_k від витрати видихуваного повітря G для різних значень температури робочої камери T_k (при температурі видихуваного повітря 33.5°C та його відносній вологості 90%).

Виходячи з результатів комп'ютерного моделювання, для забезпечення необхідних режимів роботи термоелектричного приладу для збирання конденсату з повітря, що видихається людиною, достатньо одного модуля, наприклад, типу Алтек-2 виробництва Інституту термоелектрики для підтримання температури робочої камери при заданій холодопродуктивності модуля.

Q_0 , Вт

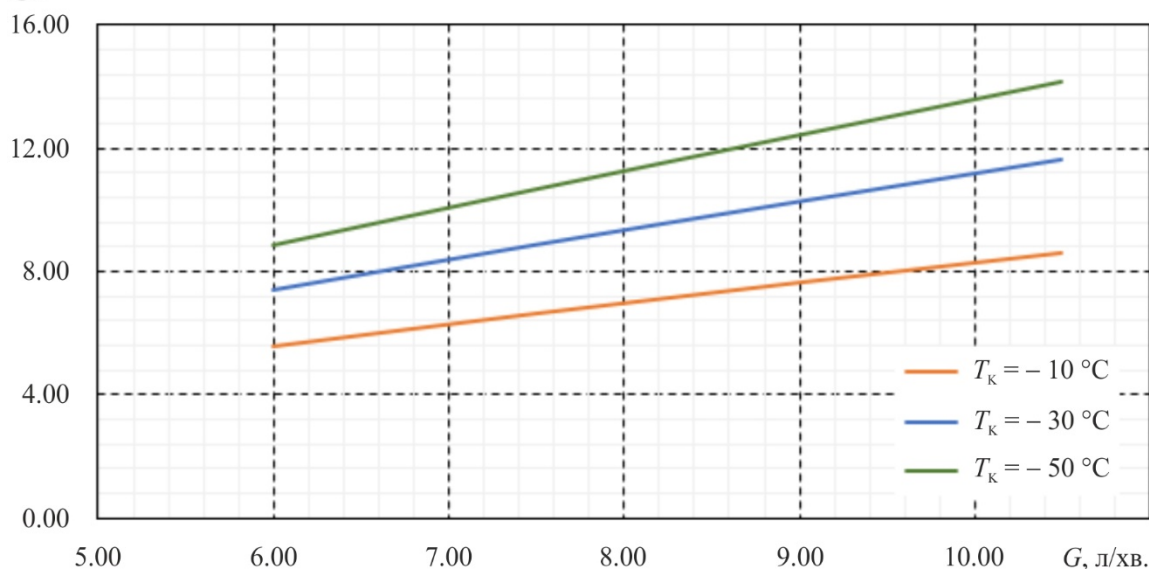


Рис. 7. Залежності теплової потужності Q_0 , яку необхідно відвести від робочої камери, від витрати видихуваного повітря G для різних значень температури робочої камери T_k (при температурі видихуваного повітря 33.5°C та його відносній вологості 90 %).

За допомогою комп'ютерного моделювання у Comsol Multiphysics для фізичної моделі, що наведена вище на рис. 1, розраховано величини натікань тепла з оточуючого середовища $Q_{\text{нат.}}$, що складаються з тепла Q_5 –натікання тепла до пробірки з оточуючого середовища через теплову ізоляцію) та Q_6 – натікання тепла до пробірки з повітряних теплообмінників через теплову ізоляцію. Результати розрахунків наведено на рис. 8.

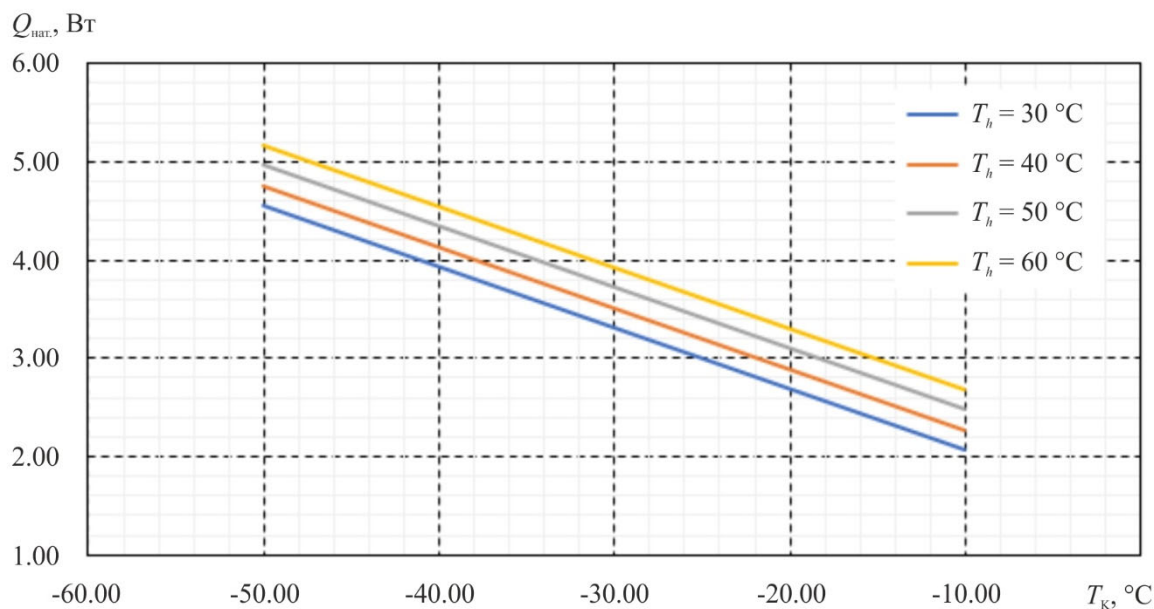


Рис. 8. Залежності натікань тепла з оточуючого середовища $Q_{\text{нат.}}$ від температури робочої камери $T_{\text{к}}$ для різних значень температури гарячої сторони термоелектричного модуля.

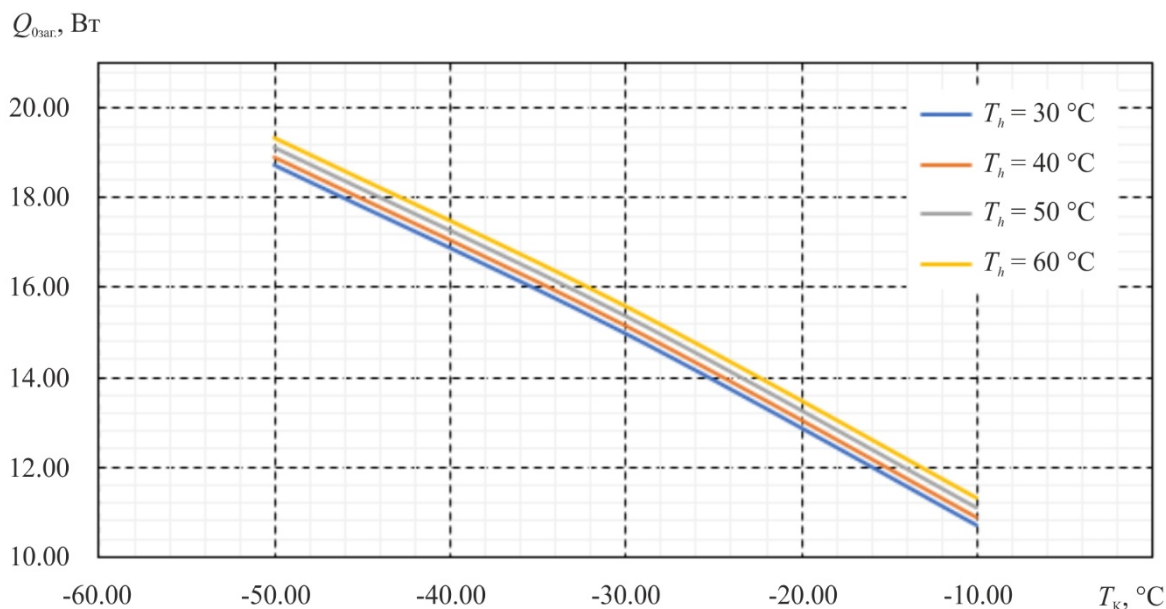


Рис. 9. Залежності холодопродуктивності термоелектричного модуля $Q_{\text{оаг.}}$ від температури робочої камери $T_{\text{к}}$ для різних значень температури гарячої сторони термоелектричного модуля.

Врахувавши максимальні значення теплової потужності Q_0 , яку необхідно відвести від робочої камери для різних значень її температури T_k , отримано залежність сумарної холодопродуктивності термоелектричного модуля $Q_{0\text{заг}}$ від температури робочої камери для різних значень температури гарячої сторони модуля (рис. 9).

Таким чином, для забезпечення необхідних режимів робочої камери приладу (температур нижче $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$) при споживаній потужності термоелектричного модуля Алтек-2 близько 145 Вт та холодопродуктивності до 20 Вт необхідна система теплообміну, що відводитиме близько 165 Вт тепла з перепадом температури відносно оточуючого середовища не вище $15\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Наведені результати є основою для подальшої розробки конструкції термоелектричного приладу для збирання конденсату з повітря, що видихається людиною.

Висновки

1. Побудовано фізичну та комп'ютерну моделі термоелектричного приладу для збирання конденсату видихуваного легеневого повітря для визначення розподілів температури та швидкості руху повітря у робочій камері приладу, встановлення закономірностей теплопередачі у такому приладі та визначення умов, якими забезпечується досягнення необхідного рівня робочих температур і покращення ефективності збирання конденсату.
2. Розраховано залежності розподілів температури та швидкості руху повітря у робочій камері приладу від температури робочої камери, вологості, температури і об'єму видихуваного повітря, величин натікань тепла з оточуючого середовища. Встановлено, що зниження температури робочої камери від $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $-50\text{ }^{\circ}\text{C}$ дозволяє підвищити швидкість збирання конденсату у 1.5 рази.
3. Встановлено, що для забезпечення необхідних режимів роботи приладу, а саме температури робочої камери нижче від $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$, холодопродуктивність термоелектричних модулів повинна складати 15 - 20 Вт.

Література

1. John Hunt. (2007). Exhaled breath condensate-an overview. *Immunol Allergy Clin North Am.*, 27 (4). 587 – 596.
2. Hunt J. (2002). Exhaled breath condensate: An evolving tool for noninvasive evaluation of lung disease. *J Allergy Clin Immunol*, 110(1): 28 – 34.
3. Horvath I., Hunt J. and Barnes P.J. (2005). Exhaled breath condensate: methodological recommendations and unresolved questions. *Eur Respir J*, 26: 523 – 548.
4. Reinhold P, Langenberg A, Becher G, Rothe M. (1999). Breath condensate-a medium obtained by a noninvasive method for the detection of inflammation mediators of the lung. *Berl Munch Tierarztl Wochenschr*, 254 – 259.
5. Efstathia M. Konstantinidi, Andreas S. Lappas, Anna S. Tzortzi, and Panagiotis K. Behrakis. Exhaled breath condensate: technical and diagnostic aspects (2015). *Scientific World Journal*. V 2015, Article ID 435160, 25 pages.
6. Mansour, Elias & Vishinkin, Rotem & Rihet, Stéphane & Saliba, Walaa & Fish, Falk & Sarfati, Patrice & Haick, Hossam. (2019). Measurement of temperature and relative humidity in exhaled breath. *Sensors and Actuators B Chemical*. 127371. 10.1016/j.snb.2019.127371.

Надійшла до редакції: 15.02.2023.

Anatychuk L.I., Acad. NAS Ukraine^{1,2}
Kobylianskyi R.R., Cand. Sc (Phys & Math)^{1,2}
Lysko V.V., Cand. Sc (Phys & Math)^{1,2}

¹Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1 Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine;

²Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, 2 Kotsiubynskyi str.,
Chernivtsi, 58000, Ukraine
e-mail: anatych@gmail.com

COMPUTER DESIGN OF A THERMOELECTRIC PULMONARY AIR CONDENSER FOR THE DIAGNOSTICS OF CORONAVIRUS AND OTHER DISEASES

The physical model of a thermoelectric device for collecting exhaled air condensate is considered. By means of computer simulation, the distribution of temperature and velocity of air movement in the working chamber of the device was determined depending on the temperature of the working chamber, as well as humidity, temperature and volume of exhaled air. The results of calculations of the cooling efficiency of thermoelectric modules, necessary to ensure the specified modes of operation of the device, are given.

Key words: diagnostics, coronavirus, condensate, exhaled air, thermoelectric cooling.

References

1. John Hunt. (2007). Exhaled breath condensate—an overview. *Immunol Allergy Clin North Am.*, 27 (4). 587 – 596.
2. Hunt J. (2002). Exhaled breath condensate: An evolving tool for noninvasive evaluation of lung disease. *J Allergy Clin Immunol*, 110(1):28 – 34.
3. Horvath I., Hunt J. and Barnes P.J. (2005). Exhaled breath condensate: methodological recommendations and unresolved questions. *Eur Respir J*, 26: 523 – 548.
4. Reinhold P, Langenberg A, Becher G, Rothe M. (1999). Breath condensate – a medium obtained by a noninvasive method for the detection of inflammation mediators of the lung. *Berl Munch Tierarztl Wochenschr*, 254 – 259.
5. Efstathia M. Konstantinidi, Andreas S. Lappas, Anna S. Tzortzi, and Panagiotis K. Behrakis. Exhaled breath condensate: technical and diagnostic aspects (2015). *Scientific World Journal*. V 2015, Article ID 435160, 25 pages.
6. Mansour, Elias & Vishinkin, Rotem & Rihet, Stéphane & Saliba, Walaa & Fish, Falk & Sarfati, Patrice & Haick, Hossam. (2019). Measurement of temperature and relative humidity in exhaled breath. *Sensors and Actuators B Chemical*. 127371. 10.1016/j.snb.2019.127371.

Submitted: 15.02.2023.