# DESCONTAMINACIÓN DE BARBIJOS N95 POR MICROONDAS. MODELADO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN COMPUTACIONAL

Javier R. Arballo†♣, Alejandro R. Lespinard‡, Sandro M. Goñi†♣ y Rodolfo H. Mascheroni†

†CIDCA (UNLP-CONICET-CICPBA), 47 y 116 (B1900AJJ), La Plata, Argentina. <u>jrarballo@conicet.gov.ar</u>
 **&** Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, 1 y 47 (B1900TAG), La Plata, Argentina
 ‡Centro de Investigación y Transferencia Villa María (CIT VM), CONICET Córdoba, Universidad Nacional de Villa María, Av. Arturo Jauretche 1555, (5900), Villa María, Argentina, <u>alespinard@conicet.gov.ar</u>, <u>www.unvm.edu.ar</u>

Resumen: En este trabajo se presenta el desarrollo de un modelo matemático que describe los fenómenos físicos que se producen durante el proceso de descontaminación con vapor de barbijos N95 en un horno microondas doméstico. El modelo fue resuelto en un software de elementos finitos, usando una geometría 3D realista del barbijo, lo cual requirió ~800k elementos finitos y un tiempo de cálculo de ~5 h para simular 10 minutos de proceso. La resolución del modelo permitió predecir y analizar la distribución del campo electromagnético, la fluidodinámica del vapor generado, y la distribución y evolución de las temperaturas e inactivación del virus en el barbijo. El modelo desarrollado es un buen punto de partida para simular el tratamiento y se prevé incluir la rotación del barbijo para representar mejor las condiciones reales, como también su validación experimental.

Palabras clave: COVID-19, barbijos, descontaminación, microondas, simulación, elementos finitos 2000 AMS Subjects Classification: 80M10, 80A19, 35Q30, 78A25

## 1. INTRODUCCIÓN

Uno de los elementos indispensables para el personal de salud en protocolos de manejo de pacientes infectados con SARS-CoV-2, es el uso de equipos de protección personal (EPP) para evitar un potencial contagio. La actual pandemia de COVID-19 ha originado una sobredemanda a nivel mundial de respiradores N95 y otros elementos de protección, que no ha podido ser satisfecha, generando una situación de riesgo para todo el personal de salud por la escasez de los mismos. A raíz de lo anterior, se hace necesario buscar alternativas que permitan mitigar la insuficiente cantidad de EPP, especialmente de barbijos N95, utilizados por el personal sanitario durante el tratamiento de pacientes contagiados con SARS-CoV-2.

En este sentido, se han estudiado diversos métodos de desinfección de barbijos N95 para su posterior reutilización, asegurando así la disponibilidad de este crucial elemento para el personal de salud. Entre los métodos de descontaminación, el tratamiento térmico con calor húmedo resulta ser un método eficiente y accesible que permite la desactivación del SARS-COV-2 y otros virus, manteniendo la integridad de la máscara y su capacidad filtrante luego de varios ciclos de calentamiento. Entre los tratamientos térmicos, la generación de vapor por microondas se presenta como un método de descontaminación con gran potencial debido a su efectividad y a que solo requiere de materiales y equipamiento de uso generalizado.

En un estudio reciente [1], evaluaron el uso de un microondas doméstico para la descontaminación de barbijos N95 (3M, modelo 1860), concluyendo que 3 min de tratamiento permitieron alcanzar 6 reducciones decimales del virus y este proceso se puede realizar hasta 20 veces sin dañar la capacidad de filtración y ajuste de la mascarilla.

No obstante, pese a las innumerables ventajas que esta tecnología parece ofrecer para la descontaminación de respiradores, aún se requieren de estudios que posibiliten conocer en mayor profundidad los fenómenos físicos que se desarrollan en el interior del microondas durante el proceso, como el calentamiento electromagnético, la fluidodinámica del vapor, la transferencia de calor del medio calefactor hacia el barbijo y la influencia de los mismos en la inactivación del virus.

En base a lo anterior el objetivo de este trabajo consiste en desarrollar un modelo matemático que describa los fenómenos físicos que se desarrollan durante la descontaminación de barbijos por microondas, y que posibilite la evaluación, el diseño y la optimización de dicho proceso.

#### 2. MODELADO MATEMÁTICO

En el desarrollo de este modelo preliminar, sin rotación del plato del microondas, se consideraron varios fenómenos físicos: 1) la distribución del campo electromagnético dentro del horno; 2) el flujo de

aire dentro del horno; 3) el calentamiento y la evaporación de agua contenida en un recipiente; 4) el transporte de vapor y de energía en el aire; 5) la destrucción del virus en el barbijo, asociada a la temperatura del mismo. La geometría empleada para representar el sistema en estudio consta de 6 partes diferentes (Figura 1a): cavidad del horno con secciones entrada y salida del aire, la guía de onda, el magnetrón, el recipiente de vidrio, el agua y el barbijo a tratar (mascarilla filtrante y bandas de sujeción).



Figura 1: a) Geometría y b) mallado del horno de microondas incluyendo un recipiente con agua y el barbijo N95

### 2.1. DISTRIBUCIÓN DEL CAMPO ELECTROMAGNÉTICO

La distribución estacionaria del campo electromagnético en el horno y en los materiales dieléctricos (agua, barbijo) se obtiene resolviendo las ecuaciones de Maxwell [2]:

$$\nabla \times \mu_r^{-1} (\nabla \times E) - k_o^2 \varepsilon_{rc} E = 0 \tag{1}$$

donde  $\varepsilon_{rc}$  es la permitividad dieléctrica compleja dependiente de las propiedades dieléctricas ( $\varepsilon_{rc} = \varepsilon' - j \varepsilon''$ ),  $\mu_r$  es la permeabilidad magnética y  $k_o$  es la constante de propagación. Para las paredes metálicas del horno y de la guía de onda se empleó la condición de contorno de conductor eléctrico perfecto, mientras que la fuente de energía electromagnética se incorporó a través de la condición de contorno de puerto coaxial (magnetrón), para la frecuencia de operación de 2.45 GHz. La potencia absorbida por los materiales dieléctricos por unidad de volumen, debido a su interacción con las microondas se expresa como:

$$Q_{MW}(x, y, z, t) = 0.5 \,\omega \varepsilon_0 \varepsilon'' \left| E \right|^2 \tag{2}$$

donde *E* es la intensidad del campo eléctrico,  $\omega$  es la frecuencia angular y  $\varepsilon_0$  es la permitividad en el vacío.

## 2.2. FLUIDODINÁMICA EN EL HORNO DE MICROONDAS

Considerando trabajos publicados sobre esta temática, se estableció en primera instancia un modelo de flujo laminar incompresible, dado que se espera que las velocidades de circulación de aire sean bajas [3], y se trabajó en estado estacionario, dado que se asume que se alcanza muy rápidamente un estado estable del sistema. Entonces, en el aire se plantearon el balance de cantidad de movimiento y de materia:

$$\rho_{aire}\vec{u}.\nabla\vec{u} = \nabla \cdot \left(\mu_{aire} \left(\nabla\vec{u} + \left(\nabla\vec{u}\right)^T\right)\right) - \nabla \cdot p \tag{3}$$

(4)

$$\nabla \vec{u} = 0$$

donde *u* es el vector de velocidad del aire,  $\mu_{aire}$  es la viscosidad dinámica del aire y *p* es presión. Como condiciones de contorno se establecieron velocidad nula en todas las paredes y superficies (como las paredes del recipiente, el agua y el barbijo), flujo másico en la sección de entrada, y presión prescripta en la sección de salida.

## 2.3. TRANSFERENCIA DE CALOR Y MATERIA

Para el desarrollo del modelo de la transferencia de calor se deben considerar los sistemas: aire, agua y barbijo (para el recipiente de vidrio no se muestra el balance, es solo conducción):

$$\rho_{aire}C_{p\,aire}\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k_{aire}\nabla T) - \rho_{aire}C_{p\,aire}\vec{u}\,\nabla T \tag{5}$$

$$\rho_{agua}C_{p\,agua}\frac{\partial T}{\partial t} + \rho_{agua}C_{p\,agua}u_{agua} \cdot \nabla T = \nabla(k_{agua}\nabla T) + Q_{MW}$$
(6)

$$\rho_{n95}C_{p\ n95}\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k_{n95}\nabla T) + Q_{MW}$$
<sup>(7)</sup>

En el agua se debe considerar el balance de cantidad de movimiento para flujo incompresible y laminar (Ecs. 8 y 9), para incluir el efecto del cambio de densidad sobre la distribución de temperatura.

$$\rho_{agua} \frac{\partial u_{agua}}{\partial t} + \rho_{agud} \mu_{agua} \cdot \nabla u_{agua} = \nabla \cdot \left( -p_{agua} I + \mu_{agua} \left( \nabla u_{agua} + \left( \nabla u_{agua} \right)^{T} \right) \right) + \rho_{aguaini} g \beta (T - T_{bni})$$

$$\partial \rho_{agua} = \nabla \cdot \left( -p_{agua} I + \mu_{agua} \left( \nabla u_{agua} + \left( \nabla u_{agua} \right)^{T} \right) \right) + \rho_{aguaini} g \beta (T - T_{bni})$$

$$(8)$$

$$\frac{\partial \rho_{agua}}{\partial t} + \rho_{agua} \nabla \cdot u_{agua} = 0 \tag{9}$$

El agua que se evapora se debe tener en cuenta en el balance de vapor de agua en el aire:

$$\frac{\partial C_{vapor}}{\partial t} = \nabla (D_{va} \nabla C_{vapor}) - \vec{u} \nabla C_{vapor}$$
(10)

donde  $\rho$  es la densidad,  $C_p$  es la capacidad calorífica específica (J/(kg °C)), T es la temperatura (°C), t es el tiempo (s), k es la conductividad térmica (W/(m °C)), g es la aceleración de la gravedad,  $\beta$  es el coeficiente de expansión volumétrica, C es la concentración molar (mol/m<sup>3</sup>),  $D_{va}$  es el coeficiente de difusión de vapor en el aire (m<sup>2</sup>/s) y los subíndices indican el material.

Para las fronteras del agua-recipiente, recipiente-aire y aire-barbijo se aplica la condición de continuidad térmica y para el borde superior del agua en contacto con el aire, se aplica la condición evaporativa [4]. La concentración de vapor y la temperatura en la sección de entrada de aire se consideró constante, mientras que a la salida se usó una condición de contorno de flujo nulo.

## 2.4. CINÉTICA DE DESCONTAMINACIÓN

Para simular la destrucción del contaminante, se acopló en el barbijo una cinética de inactivación térmica del SARS-COV-2[5]:

N° de reducciones decimales = 
$$\frac{\int_0^t 10^{(T-T_{ref})/z} dt}{D_{ref}} = \frac{\int_0^t 10^{(T-60^\circ C)/6.94^\circ C} dt}{1.69 \min}$$
 (11)

## 2.5. RESOLUCIÓN DEL MODELO

El modelo se resolvió utilizando el Método de los Elementos Finitos mediante el software COMSOL Multiphysics (versión 5.3a), que permite trabajar con diferentes modelos físicos simultáneamente. Se realizó un estudio previo sobre la influencia del mallado en cada parte del modelo (resultados no mostrados); seleccionándose finalmente una malla compuesta por 782995 elementos (Figura 1b).

#### 3. RESULTADOS

La resolución del modelo completo requirió un tiempo de cálculo computacional de 5.25 horas para simular 10 minutos de calentamiento (PC Intel Core i9-9900K 3.6GHz, 64 GB RAM). La Figura 2a muestra la evolución de las temperatura mínima y máxima del barbijo para un tiempo de calentamiento de 10 minutos, observándose una gran diferencia entre ambas temperaturas que resultan ser críticas. Las temperaturas mínima y máxima deben controlarse durante el proceso para garantizar la descontaminación del barbijo y preservar las propiedades de filtración y ajuste del barbijo, respectivamente. Al final de ese tiempo la superficie del barbijo se encuentra mayormente a una temperatura elevada; sin embargo como es característico de las microondas también se presentan zonas de menor temperatura (Figura 2b-c). Este efecto se debe por un lado a la distribución no homogénea del campo electromagnético que genera zonas de baja absorción de energía (Figura 2d), y por otro lado al ingreso de aire frio exterior (Figura 2c) que incide sobre la zona antes mencionada. Consecuentemente, dichos fenómenos conllevan a un aumento en el tiempo de proceso necesario para alcanzar la inactivación viral deseada (>5-log<sub>10</sub>) en la zona de calentamiento lento antes descripta. Esto pone de manifiesto la necesidad de incluir el efecto de la rotación dentro de la formulación del modelo, lo cual permitiría una distribución más uniforme de las temperaturas y en consecuencia una reducción en los tiempos del tratamiento térmico.



Figura 2: a) Evolución de la temperatura mínima y máxima en el barbijo, b) Distribución superficial de temperatura en el barbijo a 10 minutos, c) Líneas de flujo de aire y temperatura superficial en el barbijo a 10 minutos, d) Distribución del Campo Eléctrico en el barbijo y la cavidad (corte transversal).

#### 4. CONCLUSIONES

Se desarrolló un modelo que describe los fenómenos físicos más relevantes que se producen durante la descontaminación de barbijos por microondas. El modelo desarrollado podría aún mejorarse incluyéndose en el mismo la rotación del sistema y las propiedades dieléctricas del material del barbijo considerando el efecto de la humedad. Se prevé avanzar en dichas mejoras del modelo como así también en la validación del mismo mediante mediciones experimentales de temperatura y análisis microbiológicos en barbijos 3M modelo 1860.

### AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Universidad Nacional de Villa María (UNVM), a la Universidad Nacional de La Plata (UNLP) y al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET, Proyecto PIP 11220130100220CO) por el financiamiento del presente trabajo de investigación.

#### REFERENCIAS

[1] K.E. ZULAUF, A.B. GREEN, A.N. NGUYEN BA, T. JAGDISH, D. REIF, R. SEELEY, A. DALE, J.E. KIRBY, *Microwave-generated steam decontamination of N95 respirators utilizing universally accessible materials*, mBIO, 11(2020), 11:e00997-20, doi.org/10.1128/mBio.00997-20.

[2] A.K. DATTA, V. RAKESH, *Principles of microwave combination heating*, Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety, Vol. 12 (2012), pp. 24-39.

[3] P. VERBOVEN, A.K. DATTA, N.T. ANH, N. SCHEERLINCK, B.M. NICOLAI, Computation of airflow effects on heat and mass transfer in a microwave oven, Journal of Food Engineering, Vol. 59 (2003), pp. 181–190.

[4] J.R. ARBALLO, S.M. GOÑI, R.H. MASCHERONI, Modeling of fluid dynamics and water vapor transport in microwave ovens, Food and Bioproducts Processing, Vol. 119 (2020), pp. 75-87.

[5] L. GUILLIER, S. MARTIN-LATIL, E. CHAIX, A. THÉBAULT, N. PAVIO, S. LE PODER, C. BATÉJAT, F. BIOT, L. KOCH, D.W. SCHAFFNER, M. SANAA, *Modeling the inactivation of viruses from the Coronaviridae family in response to temperature and relative humidity in suspensions or on surfaces*, Applied and environmental microbiology, Vol. 86 (2020), e01244-20, doi:10.1128/AEM.01244-20.