

**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI GENOVA**

**SCUOLA POLITECNICA**

**DIME**

**Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Energetica,  
Gestionale e dei Trasporti**



**Tesi di Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica  
Energia e Aeronautica**

**Simulazione numerica del comportamento fluidodinamico  
di modelli bioispirati alle diatomee**

**Relatore:**

Chiar.<sup>mo</sup> Prof. Ing. Carlo Cravero

**Correlatore:**

Dott. Ing. Diego Rossini

**Allievo:**

Pietro Trovato

Ottobre 2026

# **Simulazione numerica del comportamento fluodinamico di modelli bioispirati alle diatomee**

## **Sommario**

Lo studio di tesi qui descritto è volto allo sviluppo di un modello computazionale per caratterizzare il comportamento fluodinamico della struttura interna ad una *Diatomea Coscinodiscus*, una particolare tipologia di diatomea oggi oggetto di studio, a causa delle interessanti proprietà meccaniche strutturali.

La molteplicità di possibili applicazioni, da quelle in campo biomedico a quelle civili ed industriali, ha portato alla necessità di eseguire un'analisi di caratterizzazione del comportamento fluodinamico in funzione di differenti parametri in input.

Le simulazioni, effettuate per mezzo del pacchetto per l'analisi CFD del software ANSYS, hanno permesso di caratterizzare il comportamento fluodinamico della struttura interna della diatomea, che ne costituisce l'involucro nonché la struttura portante, focalizzandosi sugli andamenti di caduta di pressione, con particolare attenzione allo strato più esterno del guscio, il *Cribellum*, che agisce da strato poroso filtrante.

# **Numerical simulation of the fluid dynamics for diatoms bioinspired models**

## **Abstract**

The thesis study described here aims to develop a computational model to characterize the fluid-dynamic behavior of the internal structure of the *Coscinodiscus diatom*, a specific type of diatom currently under investigation due to its interesting structural-mechanical properties.

The wide range of potential applications, spanning from biomedical to civil and industrial fields, has necessitated an analysis characterizing its fluid-dynamic behavior in relation to various input parameters.

CFD simulations analysis, performed by using ANSYS software, enabled the characterization of the fluid-dynamic behavior of the diatom's internal structure, which serves as both its casing and load-bearing framework. The study is focused on pressure drop patterns, paying particular attention to the shell's outermost layer, the *cribellum*, which acts as a porous filtering layer.

# Ringraziamenti

Con questa tesi si conclude un percorso non solo di apprendimento ma anche un di crescita personale, costellato di eventi ed emozioni di qualunque sfumatura. Che siano stati momenti belli o brutti, il traguardo più grande è stato nelle persone che mi hanno supportato, spronato a dare il meglio e credere in me stesso.

Vorrei iniziare ringraziando il Prof. Carlo Cravero e l'Ing. Diego Rossini, che mi hanno supportato durante i mesi difficili che hanno accompagnato il periodo di stesura di questo elaborato.

Grazie alla Piscina di San Fruttuoso e a tutti i colleghi-amici, grazie per aver riposto in me la fiducia a soli 18 anni, dandomi l'opportunità di imparare ad insegnare e per poter trasmettere la mia passione alle nuove generazioni.

Grazie a tutti gli amici dello sport, grazie per le corse sotto il sole e sotto la pioggia, per le pedalate di ore e ore, grazie per le nuotate in mare aperto e per tutti i momenti di spensieratezza e felicità. Grazie per avermi dato una nuova linfa, per avermi spronato a superare i miei limiti e per avermi accompagnato in un'impresa sportiva enorme, che mi ha fatto prendere coscienza delle mie capacità e mi ha fatto capire cosa si può raggiungere con la volontà e il duro lavoro.

Grazie agli amici dell'università, per tutte le ore passate a studiare insieme e per il supporto quando pensavo di non essere all'altezza di questo traguardo. Grazie per tutta la leggerezza nei momenti più difficili. Grazie per i caffè, le chiacchiere, le pile di fogli di brutta, consumati per scrivere e riscrivere formule e dimostrazioni, e soprattutto grazie per tutte le partite a cirulla dopo pranzo, costellate di risate e battute. In particolare, grazie ad Anna, per tutti i giorni passati a studiare insieme, un passo dopo l'altro, per avermi aiutato a rimettermi in pari quando sono tornato indietro da Torino e per la capacità di leggere tra le righe, capendomi nei momenti difficili senza fare domande, ma semplicemente essendoci.

Grazie a quelle persone che ci sono sempre state e che hanno un posto speciale nel mio cuore, Lorenzo, Niccolò, Maddalena, Umberto, Antonio, Matteo. Grazie per avermi supportato nei momenti più difficili, ma soprattutto per i momenti di amicizia vera, i film, le cene, le serate alla playstation e tutte quelle cose che si possono misurare solo con il tempo speso insieme.

Grazie a Giorgia, che la vita mi ha fatto incontrare in una sera autunnale di Torino, da perfetti sconosciuti. Grazie per avermi fatto ricredere nelle persone e per avermi teso una mano quando tutto intorno era in dubbio.

Grazie a Fabienne e Roberto. Grazie al nonno Luigi e alla nonna Brigitte. Grazie ai ragazzi, Alessandro, Cedric e Robert. La mia seconda famiglia, per cui ci sarò sempre.

Grazie alla mia famiglia. Grazie a mio papà Roberto che, anche se il nostro rapporto è più complesso del previsto, ha sempre cercato di insegnarmi i valori dell'umiltà e del duro lavoro. Grazie ai miei nonni, Iride e Giorgio, che sono volati via un attimo prima di poter vedere questo traguardo, ma che sono sempre stati i miei più grandi sostenitori e che ne sarebbero estremamente orgogliosi. Grazie a mio fratello Marco che, ai miei occhi, è sempre rimasto quel fratellone di ispirazione; grazie alla sua presenza non ho mai avuto paura di nulla. Il più grande grazie va alla mia mamma, Barbara, che mi ha sempre sostenuto nei momenti più difficili e in ogni mia scelta. Grazie per avermi cresciuto nel migliore dei modi.

Infine, grazie a Giorgia, che è andata via troppo presto, ma che mi ha dato la motivazione per lanciarmi in questo viaggio, dandomi una ragione per dare il meglio di me ogni giorno, per affrontare le sfide più ardue di questa vita e per essere di ispirazione agli altri.

Dedicato ai miei nonni, Iride e Giorgio

Dedicato a Giorgia

Ovunque voi siate

# Indice

|                                                                                                  |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1. Introduzione .....                                                                            | 1  |
| 2. Applicazioni.....                                                                             | 6  |
| 2.1. Sistemi biomedicali (ECMO e Dialisi).....                                                   | 6  |
| 2.1.1. Sistemi ECMO.....                                                                         | 8  |
| 2.1.2. Filtraggio per la dialisi.....                                                            | 10 |
| 2.2. Drug delivery .....                                                                         | 11 |
| 2.3. Filtri a carboni attivi .....                                                               | 12 |
| 2.4. Separatori Syngas e Steam Reforming .....                                                   | 14 |
| 3. Il Modello .....                                                                              | 16 |
| 3.1. Setup del problema e condizioni al contorno.....                                            | 16 |
| 3.2. Confronto Risultati .....                                                                   | 17 |
| 3.2.1. Da Foramen a Cribrum .....                                                                | 18 |
| 3.2.1.1. Velocità in ingresso 0,2 [m/s] .....                                                    | 18 |
| 3.2.1.2. Velocità in ingresso 0,5 [m/s] .....                                                    | 19 |
| 3.2.2. Da Cribrum a Foramen .....                                                                | 22 |
| 3.2.2.1. Velocità in ingresso 0,2 [m/s] .....                                                    | 22 |
| 3.2.2.2. Velocità in ingresso 0,05 [m/s] .....                                                   | 23 |
| 3.3. Analisi DPM (Discrete Phase Method) .....                                                   | 25 |
| 3.4. Influenza della geometria dei raccordi.....                                                 | 31 |
| 3.5. Influenza della geometria del frustolo .....                                                | 36 |
| 4. Il Cribellum.....                                                                             | 43 |
| 4.1. Il modello: geometria e mesh.....                                                           | 44 |
| 4.2. Setup del problema e condizioni al contorno.....                                            | 46 |
| 4.2.1. Problematica di setup 1 (lunghezza dei canali inlet ed outlet) .....                      | 48 |
| 4.2.2. Problematica di setup 2 (Darcy -Forchheimer).....                                         | 48 |
| 4.2.3. Problematica di setup 3 (Porosità – Modello di Blake-Kozeny–Carman).....                  | 50 |
| 4.2.4. Problematica di setup 4 (Viscosità nel caso del sangue – Modello di Carreau-Yasuda) ..... | 53 |
| 4.3. Confronto Risultati e Post-processing .....                                                 | 57 |
| 4.3.1. Fluido di lavoro: Acqua (H <sub>2</sub> O).....                                           | 57 |
| 4.3.2. Fluido di lavoro: Sangue.....                                                             | 59 |
| 4.3.3. Fluido di lavoro: Aria .....                                                              | 59 |
| 4.3.4. Confronto generale .....                                                                  | 60 |
| 5. Sviluppi Futuri .....                                                                         | 62 |

|                                                                                                                     |           |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 5.1. Applicazione del Cribellum al modello in scala del Frustolo.....                                               | 62        |
| 5.2. Influenza del parametro di Yasuda sul modello .....                                                            | 63        |
| 5.3. Campagna sperimentale di analisi e validazione .....                                                           | 63        |
| 5.4. Mappe caratteristiche della caduta di pressione in funzione sia di $V_{in}$ che del coefficiente di Darcy..... | 64        |
| 6. Conclusioni .....                                                                                                | 65        |
| <b>Bibliografia .....</b>                                                                                           | <b>67</b> |

## Indice delle Figure

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 1: Diatomee pennate e centrica .....                                                                                                                                                                                                                                                                              | 1   |
| Figura 2: Diatomea centrica e principali organi interni .....                                                                                                                                                                                                                                                            | 2   |
| Figura 3: Multifunzionalità dei materiali ispirati dalle Diatomee .....                                                                                                                                                                                                                                                  | 2   |
| Figura 4: Prova di piega su 3-punti su un guscio a frustolo .....                                                                                                                                                                                                                                                        | 2   |
| Figura 5: Diagramma $\sigma$ - $\epsilon$ diatomea .....                                                                                                                                                                                                                                                                 | 3   |
| Figura 6: Grafico di Ashby resistenza vs. densità per materiali biologici presenti in natura .....                                                                                                                                                                                                                       | 3   |
| Figura 7: Dettaglio della sottostruttura interna al frustolo.....                                                                                                                                                                                                                                                        | 4   |
| Figura 8: Modello bio-ispirato ed elemento di volume rappresentativo (RVE).....                                                                                                                                                                                                                                          | 4   |
| Figura 9: Grafici carico-spostamento da esperimenti di piega su 3-punti per le singole sottostrutture e per la struttura completa gerarchizzata .....                                                                                                                                                                    | 5   |
| Figura 10: Schema funzionamento sistema ECMO.....                                                                                                                                                                                                                                                                        | 7   |
| Figura 11: Schema impiantistico ECMO e processo di filtraggio .....                                                                                                                                                                                                                                                      | 9   |
| Figura 12: Diverse tipologie di layout dei filtri per l'ossigenazione extracorporea.....                                                                                                                                                                                                                                 | 9   |
| Figura 13: Trombosi in canula di sistema ECMO .....                                                                                                                                                                                                                                                                      | 10  |
| Figura 14: Schema di funzionamento dell'organo dializzatore.....                                                                                                                                                                                                                                                         | 10  |
| Figura 15: Schema di funzionamento del drug-delivery .....                                                                                                                                                                                                                                                               | 11  |
| Figura 16: Micrografia SEM di diatomee per drug delivery: (A) struttura completa dell'involucro con frustoli purificati prima del caricamento del farmaco; (B) dettaglio distanza e diametro dei pori dei frustoli; (C) strutture dei pori delle diatomee dopo il caricamento del farmaco evidenziate da una linea. .... | 12  |
| Figura 17: Filtro a carboni attivi per cappa domestica .....                                                                                                                                                                                                                                                             | 13  |
| Figura 18: Schema gerarchico nel campo della filtrazione.....                                                                                                                                                                                                                                                            | 13  |
| Figura 19: Schema impiantistico per lo steam reforming.....                                                                                                                                                                                                                                                              | 14  |
| Figura 20: Processo di permeazione nello steam reforming.....                                                                                                                                                                                                                                                            | 14  |
| Figura 21: Direzioni del flusso .....                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 15  |
| Figura 22: Dimensioni Frustolo in [mm].....                                                                                                                                                                                                                                                                              | XVI |
| Figura 23: Vista laterale del dominio di calcolo con le estensioni (in rosa) di 80 [mm] ciascuna.....                                                                                                                                                                                                                    | 16  |
| Figura 24: Vista laterale della mesh del canale .....                                                                                                                                                                                                                                                                    | 17  |
| Figura 25: Vista 3D della mesh .....                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 17  |
| Figura 26: Struttura prismatica della mesh volumetrica interna.....                                                                                                                                                                                                                                                      | 17  |
| Figura 27: Caduta di pressione totale in funzione della velocità in ingresso .....                                                                                                                                                                                                                                       | 18  |

|                                                                                                                  |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 28: Caduta di pressione statica in funzione della velocità in ingresso .....                              | 18 |
| Figura 29: Contour di velocità da Foramen a Cribrum.....                                                         | 19 |
| Figura 30: Streamline di velocità da Foramen a Cribrum .....                                                     | 19 |
| Figura 31: Confronto visivo mesh 1, mesh 2 e mesh 3.....                                                         | 20 |
| Figura 32: Contour di velocità mesh 1 modello turbolento k- $\omega$ SST (intensità 5%).....                     | 20 |
| Figura 33: Contour di velocità mesh 2 modello turbolento k- $\omega$ SST (intensità 5%).....                     | 21 |
| Figura 34: Contour di velocità mesh 2 modello di transizione k- $\omega$ SST ( $\gamma$ -Re $\theta$ t).....     | 21 |
| Figura 35: Contour di velocità 3D mesh 2 modello di transizione k- $\omega$ SST ( $\gamma$ -Re $\theta$ t) ..... | 21 |
| Figura 36: Countour di velocità 3D mesh 1 turbolento k- $\omega$ SST (intensità 5%).....                         | 22 |
| Figura 37: Countour di velocità 3D mesh 2 turbolento k- $\omega$ SST (intensità 5%).....                         | 22 |
| Figura 38: Contour di velocità da Cribrum a Foramen.....                                                         | 22 |
| Figura 39: Streamline di velocità da Cribrum a Foramen .....                                                     | 23 |
| Figura 40: Contour di velocità mesh 2 modello laminare .....                                                     | 24 |
| Figura 41: Contour di velocità mesh 1 modello turbolento k- $\omega$ SST (intensità 5%).....                     | 24 |
| Figura 42: Contour di velocità mesh 2 modello di transizione k- $\omega$ SST ( $\gamma$ -Re $\theta$ t).....     | 24 |
| Figura 43: Contour di velocità mesh 3 modello di transizione k- $\omega$ SST ( $\gamma$ -Re $\theta$ t).....     | 24 |
| Figura 44: Streamline 3D modello laminare.....                                                                   | 25 |
| Figura 45: Streamline 3D modello turbolento k- $\omega$ SST (intensità 5%).....                                  | 25 |
| Figura 46: Streamline 3D modello transizionale .....                                                             | 25 |
| Figura 47: Distribuzione gaussiana diametro delle particelle.....                                                | 26 |
| Figura 48: Andamento caduta di pressione.....                                                                    | 27 |
| Figura 49: Istogramma tempi di residenza per iniezione di 50 particelle.....                                     | 28 |
| Figura 50: Tracciamento percorso da una singola particella nel percorso Foramen-Cribrum .....                    | 28 |
| Figura 51: Deposito particelle all'ingresso del Foramen per 150 particelle iniettate.....                        | 28 |
| Figura 52: Istogramma tempo di residenza - dimensioni particella.....                                            | 29 |
| Figura 53: Contour velocità senza iniezione di particelle.....                                                   | 29 |
| Figura 54: Contour velocità con iniezione di 50 particelle.....                                                  | 29 |
| Figura 55: Contour velocità con iniezione di 250 particelle.....                                                 | 29 |
| Figura 56: Deposito particelle all'ingresso del Foramen per 250 particelle iniettate.....                        | 30 |
| Figura 57: Tracciamento percorso da una singola particella nel percorso Cribrum- Foramen .....                   | 30 |
| Figura 58: Tracciamento del miscelamento delle particelle con streamline di velocità .....                       | 31 |
| Figura 59: Tracciamento del miscelamento delle particelle con streamline di tempo.....                           | 31 |
| Figura 60: Frustolo con raccordi.....                                                                            | 32 |
| Figura 61: Dettaglio1 raccordo Cribrum .....                                                                     | 32 |
| Figura 62: Dettaglio 2 raccordo Cribrum .....                                                                    | 32 |
| Figura 63: Dettaglio 1 raccordo Foramen.....                                                                     | 33 |
| Figura 64: Dettaglio 2 raccordo Foramen.....                                                                     | 33 |
| Figura 65: Contour velocità senza raccordo .....                                                                 | 34 |
| Figura 66: Contour velocità con raccordo .....                                                                   | 34 |
| Figura 67: Countur di velocità 2D nello spazio .....                                                             | 34 |
| Figura 68: V <sub>in</sub> = 0,5 m/s:.....                                                                       | 36 |
| Figura 69: V <sub>in</sub> 0,005 m/s: .....                                                                      | 36 |
| Figura 70: Geometrie del frustolo in esame.....                                                                  | 37 |
| Figura 71: Dettaglio delle geometrie in esame .....                                                              | 38 |
| Figura 72: Dimensioni geometrie del frustolo .....                                                               | 38 |

|                                                                                                            |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 73: Dettaglio scie nelle diverse configurazioni geometriche, caso da Cribrum a Foramen .....        | 39 |
| Figura 74: vettori velocità caso AVG .....                                                                 | 39 |
| Figura 75: vettori velocità caso worst .....                                                               | 39 |
| Figura 76: Dettaglio scie nelle diverse configurazioni geometriche, caso da Foramen a Cribrum.....         | 40 |
| Figura 77: caso worst.....                                                                                 | 40 |
| Figura 78: caso best .....                                                                                 | 40 |
| Figura 79: Interfaccia ANSYS Workbench con schema a blocchi.....                                           | 44 |
| Figura 80: Geometria canale per analisi strato poroso .....                                                | 45 |
| Figura 81: Mesh.....                                                                                       | 45 |
| Figura 82: Dettaglio mesh strato poroso .....                                                              | 46 |
| Figura 83: Velocità in inlet e Pressione all'outlet .....                                                  | 47 |
| Figura 84: Geometria e mesh di primo tentativo .....                                                       | 48 |
| Figura 85: Setup assi di riferimento strato poroso .....                                                   | 49 |
| Figura 86: Setup coefficiente di Forchheimer .....                                                         | 50 |
| Figura 87: Setup coefficiente di Darcy .....                                                               | 50 |
| Figura 88: Simulazione dell'impacchettamento filtrante.....                                                | 51 |
| Figura 89: risultati in [bar/m].....                                                                       | 53 |
| Figura 90: Andamenti viscosità dei diversi tipi di fluidi .....                                            | 54 |
| Figura 91: Andamento della viscosità in funzione dello strain rate .....                                   | 54 |
| Figura 92: Setup modello di Carreau-Yasuda.....                                                            | 55 |
| Figura 93: Effetto del parametro di Yasuda sull'andamento della curva di flusso viscosità-shear rate ..... | 56 |
| Figura 94: risultati in [bar/m].....                                                                       | 56 |
| Figura 95: risultati in [bar/m].....                                                                       | 58 |
| Figura 96: risultati in [bar/m].....                                                                       | 58 |
| Figura 97: risultati in [bar/m].....                                                                       | 59 |
| Figura 98: risultati in [bar/m].....                                                                       | 60 |
| Figura 99: risultati in [bar/m].....                                                                       | 61 |

## Tabelle

|                                                                                                          |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabella 1: Risultati caduta di pressione .....                                                           | 20 |
| Tabella 2: Risultati caduta di pressione .....                                                           | 23 |
| Tabella 3: Caduta di pressione.....                                                                      | 26 |
| Tabella 4: Tempo di residenza.....                                                                       | 27 |
| Tabella 5: Caduta di pressione al variare della velocità in inlet a parità di particelle iniettate ..... | 30 |
| Tabella 6: Variazioni caduta di pressione in funzione del numero di particelle iniettato ...             | 31 |
| Tabella 7: Caduta di pressione.....                                                                      | 33 |
| Tabella 8: Confronto caduta di pressione con o senza raccordo.....                                       | 35 |
| Tabella 9: Confronto cadute di pressione in funzione della geometria .....                               | 38 |
| Tabella 10: Risultati caduta di pressione per le varie tipologie di geometrie.....                       | 40 |
| Tabella 11: Variazione percentuale caduta di pressione per le varie tipologie di geometrie .....         | 42 |
| Tabella 12: Risultati caduta di pressione per diverso setup di porosità.....                             | 52 |

|                                                                                                       |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabella 13: Risultati caduta di pressione H <sub>2</sub> O al variare di $v_{in}$ .....               | 57 |
| Tabella 14: Risultati caduta di pressione H <sub>2</sub> O al variare del coefficiente di Darcy ..... | 58 |
| Tabella 15: Risultati caduta di pressione per il sangue al variare di $v_{in}$ .....                  | 59 |
| Tabella 16: Risultati caduta di pressione per l'aria al variare di $v_{in}$ .....                     | 60 |

# 1. Introduzione

Fino dai tempi antichi, la natura è stata oggetto di ispirazione per l'uomo, dall'arte all'innovazione scientifica; non solo come soggetto passivo di studio, ma anche protagonista di applicazioni innovative: esempi lampanti sono le prime descrizioni filotassiche di Leonardo Da Vinci [1] fino ad arrivare all'utilizzo di muffe per ottimizzare la gestione del traffico delle metropolitane, come nel caso della rete suburbana di Tokyo [2].

Questo elaborato è volto allo studio di nuove tecnologie bio-ispirate applicabili nel campo dell'innovazione strutturale, focalizzandosi sulle proprietà fluidodinamiche di tali strutture innovative.

La biomimesi è una scienza volta allo studio e all'imitazione dei processi biologici e biomeccanici della natura; perciò, non si riferisce solo al campo dell'ingegneria dei biomateriali, ma si estende ad una più ampia varietà di applicazioni, ad esempio: funzionali, processuali, molecolari, strutturali. Di conseguenza, a causa della sua complessità, questo campo di studio necessita una conoscenza multidisciplinare in diversi settori: ingegneristico, chimico, meccanico, fisico, biologico, biomedico e biotecnologico, ecc. [3].

L'oggetto del nostro studio è la *Diatomea Coscinodiscus*, un particolare tipo di microalga facente parte della famiglia delle *Coscinodiscaceae* [4]. Le diatomee sono alghe unicellulari caratterizzate da una membrana cellulare composta da diossido di silicio ( $\text{SiO}_2$ ), comunemente chiamato silice. Questa struttura viene chiamata Frustolo ed è composta da due parti, denominate Valve, che calzano una dentro l'altra, assimilabili ad una scatola con il suo coperchio, le due parti sono poi unite da uno strato anulare che funge da cintura di giunzione, detto Girdle Band; proprio per questa caratteristica, durante le prime osservazioni al microscopio, viene coniato il termine "Diatomea", parola derivante dal greco-latino che indica "che si può separare in due parti". In particolare, possiamo distinguere due principali lignaggi evolutivi: le diatomee pennate, caratterizzate da una forma più allungata e tendente alla simmetria assiale rispetto all'asse maggiore, e le diatomee centriche, la cui simmetria è radiale rispetto all'asse verticale [5].

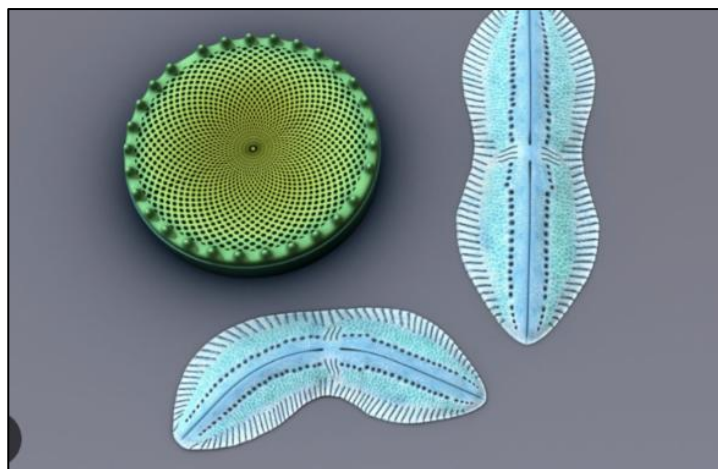


*Figura 1: Diatomee pennate e centrica*

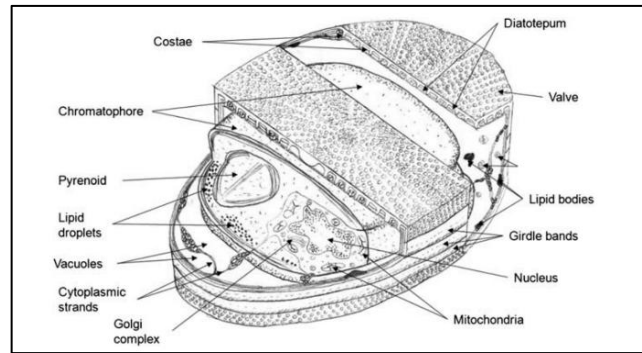


Figura 2: *Diatomea centrica* e principali organi interni

Nell'ottica della multi-funzionalità, la specie *Coscinodiscus* viene proposta come materiale bio-ispirato innovativo grazie alle sue elevate caratteristiche meccanico-strutturali unite ai comportamenti fluidodinamici e agli effetti gerarchici che, uniscono gli effetti delle varie sottostrutture in modo sinergico, incrementandone le proprietà [6].

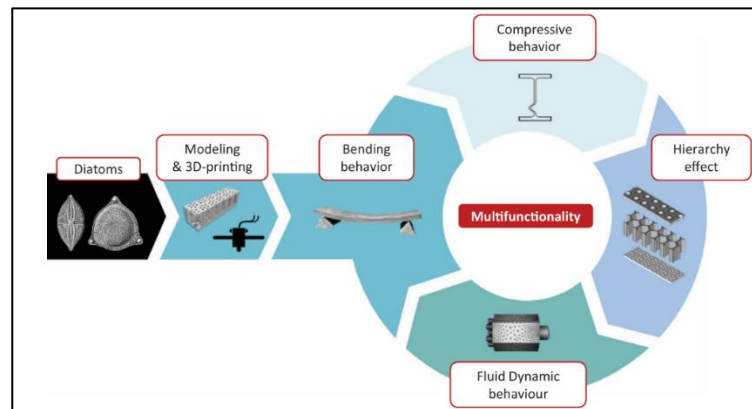


Figura 3: Multifunzionalità dei materiali ispirati dalle Diatomee

Esperimenti in laboratorio hanno evidenziato le grandi proprietà meccaniche delle diatomee. Prove di piega su 3-punti (Fig. 4), sono state eseguite sia su travi con sezione trasversale di circa  $3,5 \mu\text{m}^2$ , fabbricate a partire dal frustolo di diatomee *Coscinodiscus*, così come su piatti basali separati dal frustolo e dalla girdle band della diatomea stessa. L'utilizzo di microscopi elettronici a scansione (SEM) equipaggiati di nanoindentatori hanno evidenziato valori del modulo di Young pari a  $36,4 \pm 8,3 \text{ GPa}$  (Fig. 5) e valori di sforzo a rottura pari a  $1,1 \pm 0,3 \text{ GPa}$ .

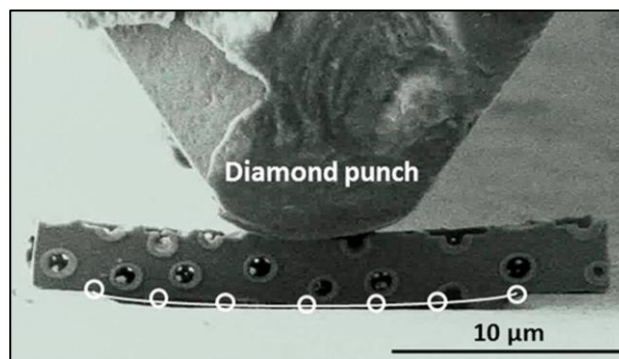


Figura 4: Prova di piega su 3-punti su un guscio a frustolo

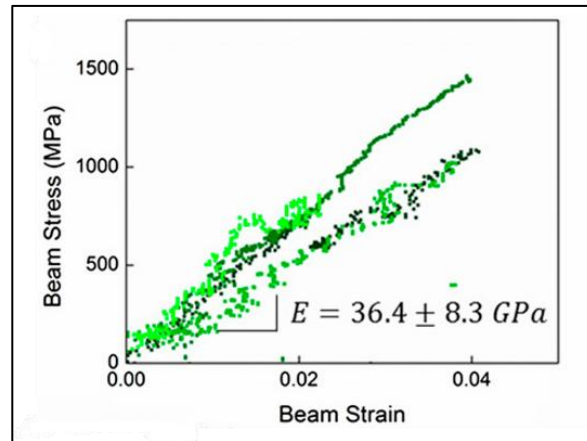


Figura 5: Diagramma  $\sigma$ - $\epsilon$  diatomea

Questi valori pongono le diatomee su un piano di rilevanza per quanto riguarda la ricerca e sviluppo di materiali biologici, grazie all'ottimo rapporto tra resistenza e densità, che permettono di porle in vicinanza del limite di massimo teorico. Come riportato nel grafico di Ashby (Fig. 6), il frustolo delle diatomee occupa una zona non ancora toccata precedentemente, con una resistenza comparabile a quella dei più forti polimeri attualmente conosciuti, ma ad una densità inferiore. Questa elevata resistenza specifica viene attribuita alla struttura a matrice di nido d'ape unitamente alla bassa densità di difetti presente all'interno della struttura stessa [7].

Proprio grazie a queste interessanti proprietà di leggerezza e resistenza, le ricerche nei campi strutturali si sono indirizzate verso la modellizzazione di queste strutture, portando alla realizzazione dei primi modelli CAD e conseguentemente ad analisi FEM e a stampe 3D di elementi di maggiore dimensione, sottoponibili a test di resistenza di varia tipologia.

Il frustolo della diatomea specie *Coscinodiscus* è caratterizzato da un'intricata struttura gerarchica (Fig. 7) composta principalmente da tre parti:

1. Un piano biomineralizzato caratterizzato da fori rinforzati, chiamato Foramen
2. Una struttura intermedia a matrice di nido d'ape, chiamata Areolae
3. Uno strato poroso finale di biosilice, più interno, chiamato Cribrum

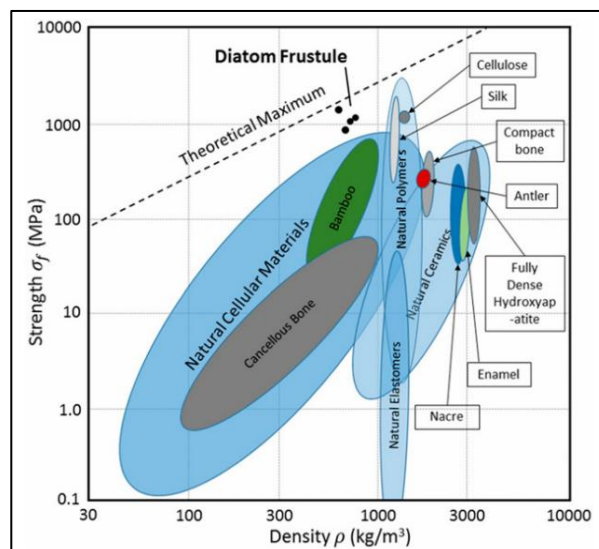


Figura 6: Grafico di Ashby resistenza vs. densità per materiali biologici presenti in natura

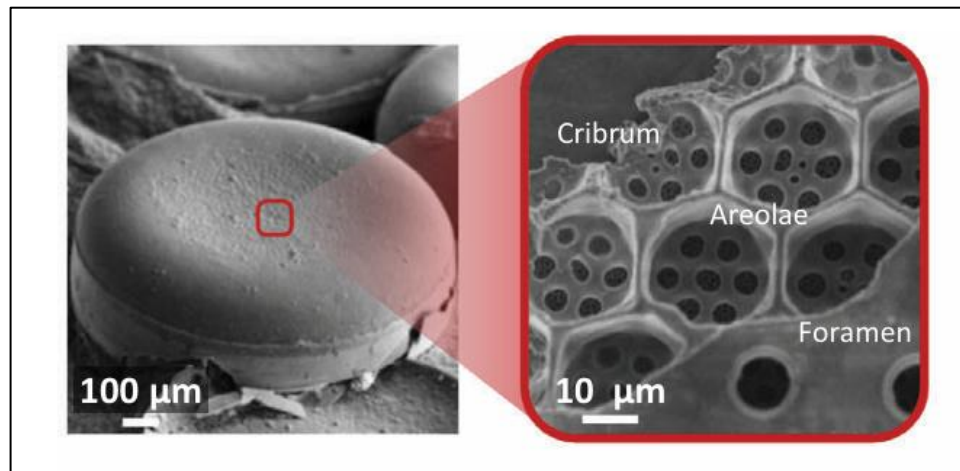


Figura 7: Dettaglio della sottostruttura interna al frustolo

La sovrapposizione degli effetti di queste tre sottostrutture, porta ad incrementare la capacità meccaniche della struttura silicea, attraverso un design gerarchico (Fig. 8). La geometria può essere isolata come un fattore decisivo nella resistenza alla frattura dei materiali simil-vetrosi, offrendo l'opportunità di valutare le relazioni tra la struttura e le sue proprietà indipendentemente dalla composizione ed evidenziando come determinati motivi strutturali possano influenzare la progettazione di ceramiche leggere e al contempo resistenti alla rottura. Studi paralleli di dinamica molecolare e simulazioni mesoscaliche, ovvero di una scala intermedia tra quella atomica/molecolare e quella macroscopica, hanno dimostrato come l'introduzione di livelli gerarchici all'interno di lamine di materiali fragili, ne abbia incrementato marcatamente la capacità di sforzo (Fig. 9), così come la tenacità e la resistenza [8] [9] [10].

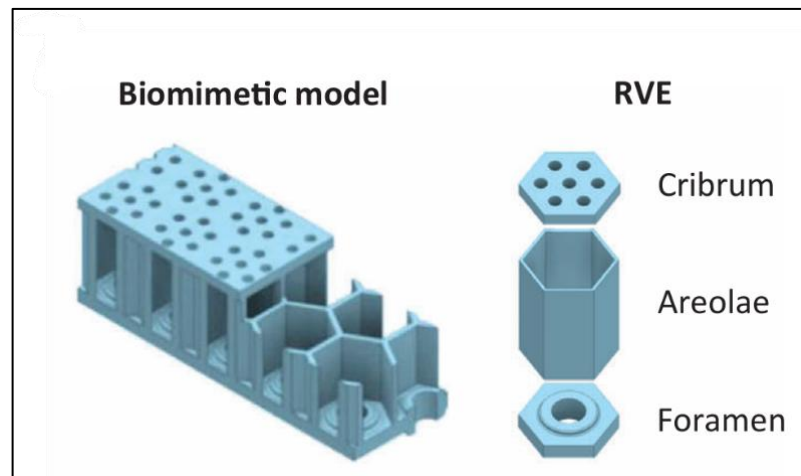


Figura 8: Modello bio-ispirato ed elemento di volume rappresentativo (RVE)

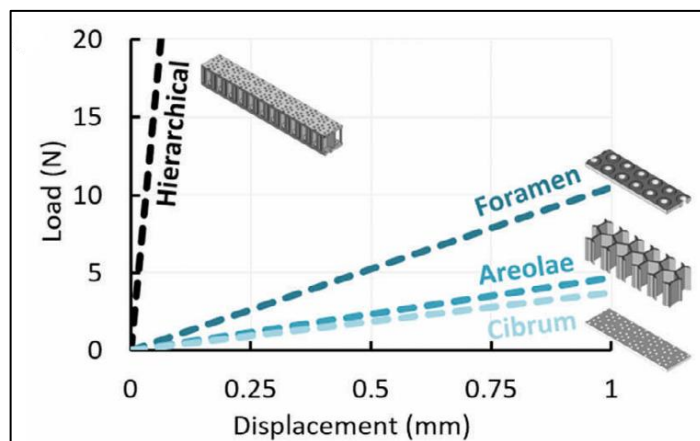


Figura 9: Grafici carico-spostamento da esperimenti di piega su 3-punti per le singole sottostrutture e per la struttura completa gerarchizzata

Oltre alle prestazioni in campo statico, le proprietà strutturali sono state oggetto di studio anche da un punto dinamico, poiché, in natura, le diatomee non sono sottoposte solamente a carichi di compressione, ma anche a carichi vibrazionali. Abdusatrov et al. [11] hanno eseguito delle simulazioni numeriche tramite analisi FEM per determinare la frequenza caratteristica di risonanza delle vibrazioni meccaniche sui frustuli di diatomee silicee, sotto condizioni a frequenze che non sarebbero direttamente accessibili attraverso misurazioni sperimentali. In queste analisi sono state esaminate sia le diatomee pennate *Synedra acus* che le centriche specie *Coscinodiscus*, ma in particolare, i risultati relativi a quest'ultime, hanno rivelato come le frequenze naturali dipendano dalle caratteristiche morfologiche del frustolo, come la rigidità del materiale, la densità, lo spessore delle pareti e il diametro delle valve e dei pori. In particolare, è stato dimostrato l'aumento della frequenza naturale alla diminuzione della scala diametrale della diatomea, della dimensione dei pori e della densità [11].

L'areola, grazie alla sua struttura a nido d'ape, rappresenta la configurazione geometrica più efficiente che la natura riesca a sviluppare, poiché massimizza la superficie utile minimizzando più possibile il perimetro [12]. Nel caso delle *Coscinodiscus*, ciò si traduce in una maggiore capacità di immagazzinamento dei nutrienti, in un volume maggiore, ma con un dispendio di energia minore per la creazione di spazio utile per il contenimento di tali elementi nutritivi. In contrasto con ciò, il ruolo delle altre sottostrutture nel facilitare l'assimilazione dei nutrienti e l'espulsione dei residui rimane oggetto di indagine [6].

Proprio da questi interrogativi nasce il principale argomento di studio di questo elaborato. Di particolare interesse per gli studi fluidodinamici è il Cribum, poiché caratterizzato da uno strato poroso filtrante chiamato Cribellum. Il Cribellum funge da prima barriera di filtraggio, come una sorta di epidermide, proteggendo il sistema dall'ingresso di eventuali germi e batteri nocivi grazie ad una struttura filtrante simile a quella del Cribum, ma ancor più fitta.

## 2. Applicazioni

Le scale di grandezza in gioco nel campo si prestano ad applicazioni nel campo della microfiltrazione, con la possibilità di applicazione sia a fluidi liquidi che di tipo gassoso. In particolare, le applicazioni che hanno suscitato il maggiore interesse sono quelle in campo biomedico, dove la microfiltrazione gioca un ruolo fondamentale nella purificazione dei fluidi corporei, quali sangue e liquidi di diuresi; ma anche rilascio mirato di medicinali come nel caso della drug delivery.

Oltre le applicazioni biomediche, altre applicazioni di rilievo sono sia in campo civile che industriale, come nel caso del filtraggio delle acque e dei vapori e fumi derivanti da attività legate alla vita quotidiana e da processi produttivi.

### 2.1. Sistemi biomedicali (ECMO e Dialisi)

La scala di grandezza in gioco, soprattutto nel caso del Cribellum, trova un ambito applicativo naturale nei dispositivi biomedicali per il trattamento extracorporeo del sangue. In particolare, l'ossigenazione a membrana extracorporea (ECMO) e l'emodialisi. Entrambe le tecnologie si basano infatti sul passaggio forzato di sangue attraverso una membrana microporosa, la cui architettura ne governa la perdita di carico e, insieme ad essa, l'efficacia dello scambio di massa, che può essere ossigeno-anidride carbonica nel caso dell'ECMO e soluti uremici nel caso della dialisi.

L'ECMO (ExtraCorporeal Membrane Oxygenation), è una tecnica di circolazione extracorporea utilizzata in ambito di rianimazione, per trattare pazienti con insufficienza cardiaca e/o respiratoria acuta grave, potenzialmente reversibile ma refrattaria ai massimi trattamenti farmacologici e medici convenzionali.

L'ossigenazione per membrana extracorporea consiste nel far circolare il sangue mediante circolazione extracorporea attraverso una sorta di polmone artificiale, che elimina l'anidride carbonica e lo rifornisce di ossigeno. Lo scambio avviene attraverso una membrana permeabile, che permette l'interscambio di  $O_2$ - $CO_2$  (Fig.10).

Esistono due tecniche, con caratteristiche e finalità cliniche differenti:

- Ecmo-vv (veno-venosa): sostiene la funzione polmonare mediante ventilazione ed ossigenazione del sangue. Solitamente viene effettuata tramite accessi vascolari in vena giugulare interna ed in vena femorale e può essere utilizzata in condizioni di grave insufficienza respiratoria solo se la funzione cardiaca sia preservata, non fornendo alcun supporto emodinamico, se non indiretto.
- Ecmo-va (veno-arteriosa): sostiene inoltre la funzione di pompa cardiaca, con accessi vascolari in vena ed arteria femorale, sostiene anche il circolo, avendo una diretta azione emodinamica, agendo sull'output cardiaco e, quindi, direttamente sulla pressione arteriosa; trova indicazione nella gestione dei gravi quadri di ipoperfusione sistemica e nella rianimazione cardiopolmonare [13] [14].

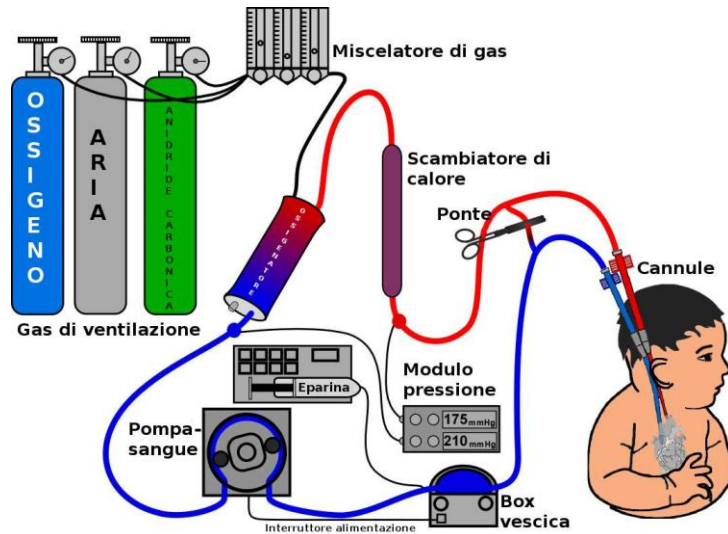


Figura 10: Schema funzionamento sistema ECMO

Le analisi effettuate sul sangue hanno portato ad approfondire alcuni aspetti riguardanti la sua modellazione, con particolare attenzione alla ricerca di un modello coerente con le caratteristiche fluidodinamiche reali. La scelta è ricaduta sul modello di Carreau-Yasuda, anziché sulla semplice rappresentazione come fluido newtoniano, che trova giustificazione nel ruolo della reologia del sangue e viene utilizzata nella simulazione CFD in numerosi studi. Nel lavoro analitico di Akbar e Nadeem [15] viene descritto il flusso sanguigno attraverso un'arteria conica con stenosi utilizzando il modello di Carreau; gli autori sottolineano come il comportamento non newtoniano del sangue diventi rilevante soprattutto a bassi tassi di shear e nei vasi di piccolo calibro, condizioni concettualmente analoghe a quelle che si incontrano nei capillari delle fibre cave di un dializzatore o di un ossigenatore, dove le dimensioni caratteristiche del condotto sono di gran lunga inferiori a quelle di un'arteria di grande diametro. Un altro studio condotto da Fragomeni [16] evidenzia che la differenza tra modello newtoniano e non newtoniano è generalmente trascurabile per la velocità e il flusso, ma diventa più marcata nelle regioni a basso sforzo di taglio a parete, motiva quella che sarà la scelta metodologica di eseguire uno studio sui parametri di forma sulla curva di andamento della viscosità in funzione dello shear stress, esplorandone la sensitività; poiché è proprio nelle condizioni di flusso lento e capillare, tipiche delle applicazioni biomedicali qui considerate, che gli effetti non newtoniani sono più difficili da trascurare a priori.

Per quanto riguarda il campo della dialisi, un dializzatore è essenzialmente un fascio di alcune migliaia di fibre cave microporose, attraverso le cui pareti avviene lo scambio diffusivo e convettivo di soluti tra il sangue e il liquido di dialisi. La perdita di carico nel comparto ematico di ciascuna fibra segue la legge di Hagen-Poiseuille:

$$\Delta P = Q * b \left( \frac{8\eta L}{\pi r^4} \right)$$

Questa non è altro che un'espressione formalmente diversa da quella di Darcy che vedremo nel capitolo 4, adottata per lo studio del Cribellum, ma concettualmente identica nella sostanza, poiché lega la caduta di pressione al prodotto tra portata, viscosità del fluido e una resistenza geometrica intrinseca del mezzo poroso attraversato [17].

Le prestazioni di un dializzatore sono fortemente legate anche alle geometrie interne degli elementi filtranti e dalle geometrie, come la superficie, la densità di impacchettamento delle fibre e lo spessore di attraversamento; fattori che, insieme, determinano il profilo di pressione lungo il dispositivo e, di conseguenza, il tasso di filtrazione interna e la possibilità di attraversamento dei soluti [18].

### **2.1.1. Sistemi ECMO**

Il sistema ECMO può essere visto come una macchina cardiopolmonare artificiale, le cui parti principali sono la pompa per il sangue e la membrana polmonare. In tal senso, fornisce supporto a lungo termine ai pazienti che soffrono di gravi insufficienze di questo genere, offrendo tempo prezioso ai pazienti in condizioni critiche. Per tale motivo, esso viene considerato attualmente il mezzo di supporto più importante per l'insufficienza cardiopolmonare grave, venendo anche considerato l'ultimo strumento di sopravvivenza per i pazienti in condizioni più critiche (Fig. 11).

Il primo prototipo di macchina ECMO viene inventata nel 1954 e fu la prima applicazione di successo di una tecnologia di bypass cardiopolmonare e successivamente, negli anni '60, iniziarono a comparire le prime membrane di ossigenazione. Le prime applicazioni di una macchina ECMO come la conosciamo ad oggi arriveranno, però, nella seconda metà degli anni '70; con un successivo e continuo sviluppo delle tecnologie mediche, dei materiali e della meccanica, che hanno portato ad una progressiva estensione della durata del supporto ECMO, trovando ampio impiego nel primo soccorso clinico d'emergenza.

L'evoluzione storica delle membrane per ECMO ha visto una notevole variazione nei decenni sia dal punto di vista dei materiali, sia dal punto di vista delle dimensioni in gioco. Le prime membrane di filtraggio per operazioni di ossigenazione del sangue risalenti agli anni '80 erano membrane omogenee, dense, non porose, in gomma siliconica con spessore parete di circa 100 [ $\mu\text{m}$ ]; successivamente si è passato a membrane microporose in polipropilene (PP) con spessore di parete di 25–50 [ $\mu\text{m}$ ], per arrivare fino alle membrane composite attuali in polimetilpentene (PMP) o polipropilene rivestito con un sottile strato siliconico, quest'ultimo di spessore circa 0,1 [ $\mu\text{m}$ ], che ne combina la resistenza meccanica del polipropilene con l'assenza di trafilamento di plasma attraverso la membrana, tipica del silicone. Questo ha permesso l'estensione temporale dell'utilizzo continuativo di questi sistemi per il supporto vitale; dalle iniziali 2 settimane per le membrane PP ad un prolungamento quasi del doppio, quasi 4 settimane, per le PMP [19] [20] [21].

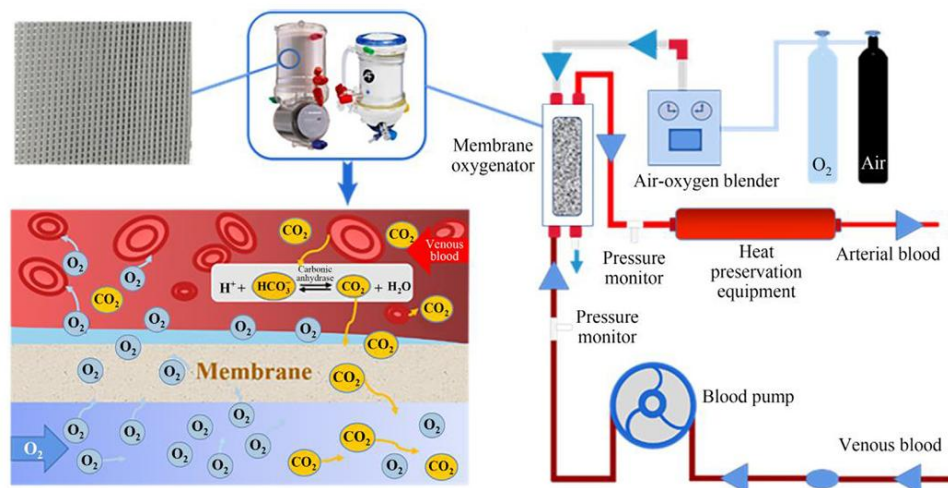


Figura 11: Schema impiantistico ECMO e processo di filtraggio

Il collegamento più stringente tra il lavoro svolto nel capitolo 4 relativo alle analisi sul Cribellum e la letteratura specifica sull'ECMO è la risoluzione della problematica principale è la stima della permeabilità di Darcy di un fascio di fibre cave, a partire dai suoi parametri geometrici, tramite l'equazione di Blake-Kozeny. Tale equazione deve essere validata da prove sperimentali su fasci di fibre disposte con diverse densità e orientazione (Fig.12), al fine di validare questa correlazione porosità-dipendente, aspetto preponderante in termini di attraversamento di una barriera porosa da parte di un fluido [22] [23].

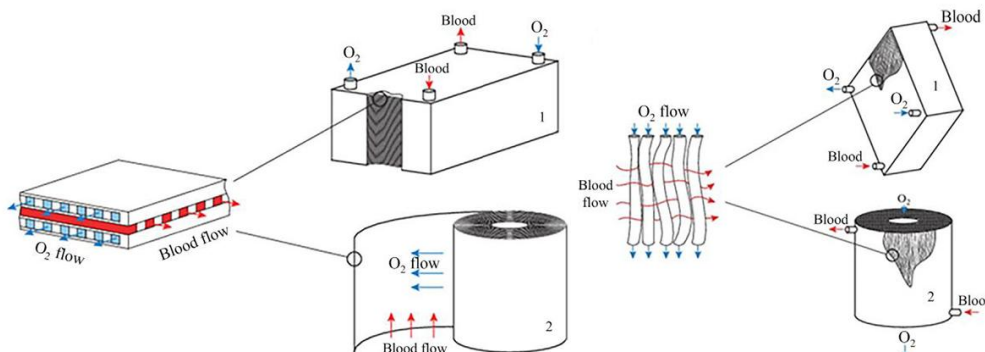


Figura 12: Diverse tipologie di layout dei filtri per l'ossigenazione extracorporea

Di fondamentale importanza per valutare l'applicabilità delle membrane è valutare le forze in gioco durante il processo di attraversamento della suddetta. Le principali cause di rottura meccanica di una membrana per l'ossigenazione del sangue sono, lo sforzo di taglio a cui sono sottoposte, la velocità di attraversamento della parete con la conseguente pressione normale che viene esercitata e il tempo di utilizzo. Questi aspetti influiscono non solo sugli organi passivi di filtraggio, ma anche sulla scelta del sistema attivo di pompaggio. [24]

Sul fronte della biocompatibilità, le strategie più recenti per ridurre il rischio di trombosi (Fig.13) ed emolisi nei circuiti ECMO sono rivestimenti a base di eparina, polimeri rilascianti ossido nitrico, e rivestimenti a base di fosforilcolina e superfici omnifobiche; ma anche l'immobilizzazione sulla superficie delle fibre cave di macro-molecole zwitterioniche, ovvero molecole elettricamente neutre che presentano al loro interno un egual numero di

cariche formali positive e negative, riduce la deposizione piastrinica di oltre il 95% rispetto a fibre non trattate, senza penalizzare significativamente la capacità di rimozione della  $CO_2$  [25] [26].



Figura 13: Trombosi in canula di sistema ECMO

### 2.1.2. Filtraggio per la dialisi

Lo step successivo alla singola membrana porosa isolata, atta all'ossigenazione del sangue, è quella dell'aggiunta di un sistema di filtraggio del sangue, per ripulirlo dalle tossine, quali l'urea, e dall'eccesso di soluti indesiderati. In questo processo il sangue carico di residui di scarto dovuti ai processi metabolici, e il dializzato, una soluzione di elettroliti diluita, a volte arricchita con glucosio, il cui compito è ristabilire il pH del sangue. Il cuore di questo processo risiede nella membrana semi-permeabile, che, separando il moto controcorrente dei due flussi (Fig. 14), permette la rimozione delle sostanze tossiche e di scarto metabolico, ma evita la fuoriuscita di proteine e cellule vitali presenti all'interno del sangue [27] [28].

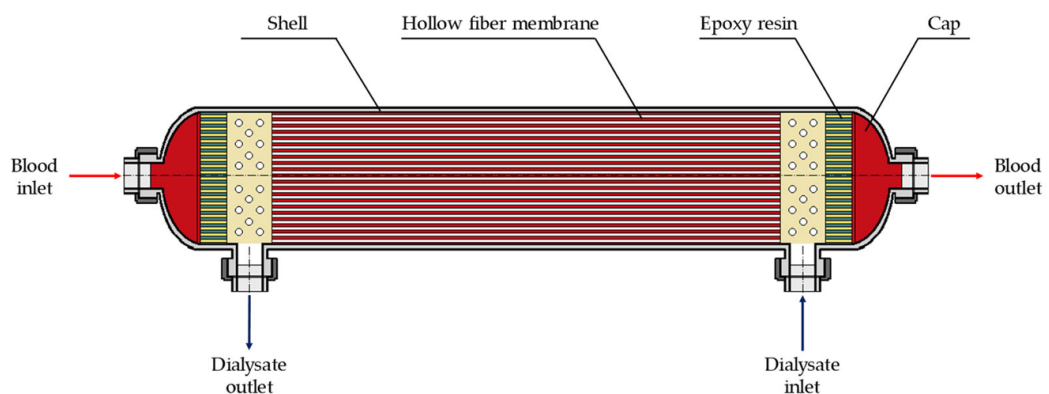


Figura 14: Schema di funzionamento dell'organo dializzatore

Sul fronte dei materiali, quelli di principale utilizzo sono il polisulfone (PSf) e il polietersulfone (PES) per membrane a fibre cave, prodotte in scala semi-pilota, riportando una struttura a doppio strato. Le membrane in PES risultano più lisce, con rugosità 16 [nm] e adatte a dialisi *low-flux*, quelle in PSf più permeabili e quindi orientate verso applicazioni *high-flux*. Sviluppi più recenti hanno portato anche alla sperimentazione di membrane

alternative in polivinilidenfluoruro (PVDF) con migliore idrofilità e minore adsorbimento rispetto alle membrane classiche in commercio [29] [30] [31].

## 2.2. Drug delivery

Il frustolo delle diatomee, oggetto di studio di questa tesi, è stato proposto in letteratura anche come sistema per il rilascio controllato di farmaci (*drug delivery*), sfruttando la medesima architettura porosa gerarchica, Cribellum, Cribrum, Foramen; qui impiegata, però, per caricare ed eventualmente rilasciare molecole terapeutiche anziché per filtrare un flusso (Fig. 15).

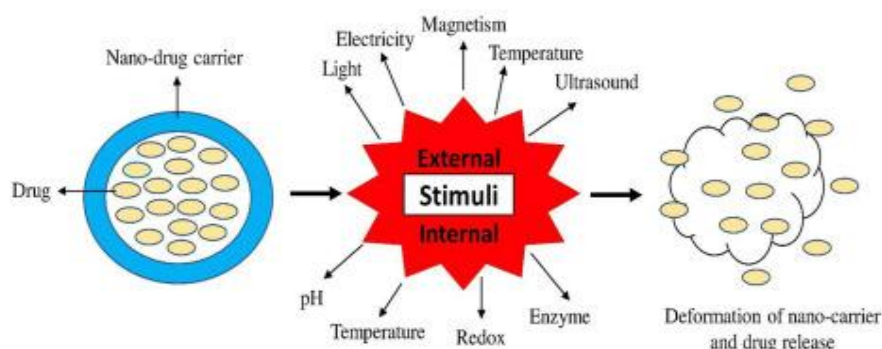


Figura 15: Schema di funzionamento del drug-delivery

Lo sviluppo di sistemi "intelligenti" di rilascio dei farmaci si basa su strutture permeabili caratterizzate da un elevato rapporto superficie/volume, elevata attività di reazione superficiale, elevata capacità di adsorbimento, elevata efficienza catalitica. Queste strutture permeabili possono essere impiegate nell'industria farmaceutica per sistemi di rilascio del farmaco prolungato o mirato, migliorando così la solubilità di farmaci scarsamente solubili e potenziandone la biodisponibilità e la biocompatibilità; infatti, il rilascio prolungato consente al farmaco di essere rapidamente metabolizzato ed eliminato dall'organismo dopo la somministrazione. In particolare, queste applicazioni si rifanno alla diatomea marina *Thalassiosira eccentrica* (Fig.16), parente stretta della specie *Coscinodiscus* [32].

Nel corso dell'ultimo decennio, i ricercatori hanno sviluppato una varietà di sistemi di somministrazione di farmaci basati sui frustoli delle diatomee per somministrare in modo efficiente farmaci idrofili e idrofobi, molecole di RNA a doppio filamento (siRNA) e antibiotici tramite assunzione orale, iniezione endovenosa e applicazione topica. Questi sistemi sono stati anche modificati per fornire funzionalità aggiuntive come il targeting magnetico e genico, una migliore solubilità, assorbimento e biocompatibilità del farmaco. Tuttavia, rimane una limitazione significativa: la bassa capacità di carico del farmaco da parte di questi sistemi. La capacità di carico del farmaco è una metrica di prestazione critica per i sistemi di somministrazione di medicinali, in particolare nelle applicazioni terapeutiche che richiedono un approccio più aggressivo al contrasto delle malattie, come nel caso del trattamento del cancro [33].

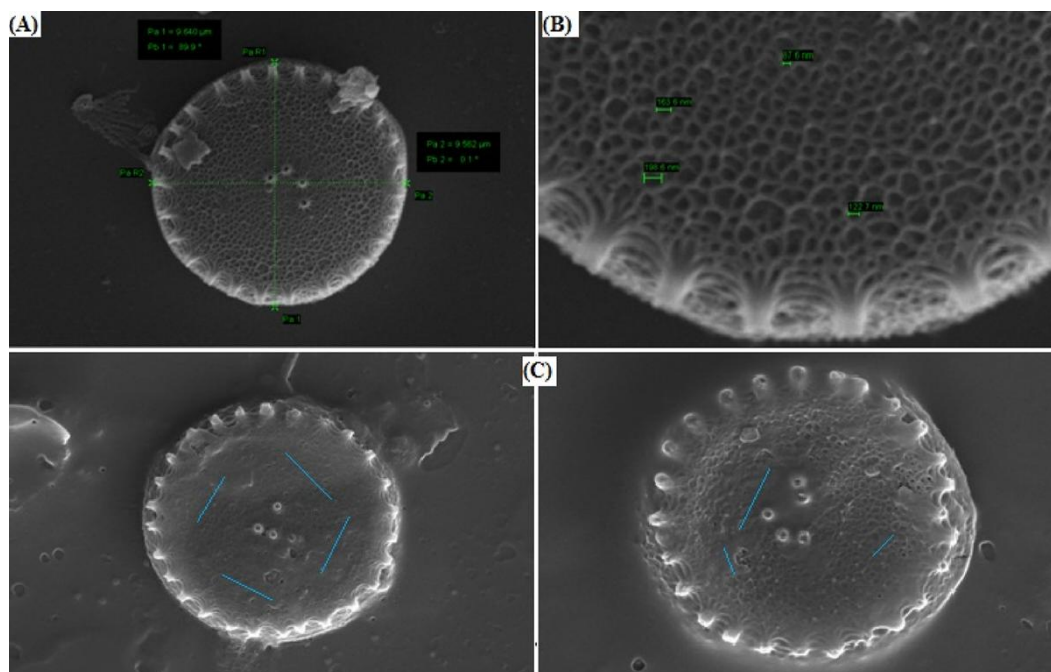


Figura 16: Micrografia SEM di diatomee per drug delivery: (A) struttura completa dell'involucro con frustoli purificati prima del caricamento del farmaco; (B) dettaglio distanza e diametro dei pori dei frustoli; (C) strutture dei pori delle diatomee dopo il caricamento del farmaco evidenziate da una linea.

Bisogna sottolineare una differenza concettuale rispetto all'approccio modellistico adottato nei capitoli 3 e 4 di questa elaborato, in cui il trasporto attraverso il mezzo poroso (Cribrum-Foramen-Cribellum) è stato descritto come un fenomeno di convezione forzata ed è governato dalla legge di Darcy-Forchheimer sotto l'azione di un gradiente di pressione imposto. Nel rilascio di un farmaco da un carrier poroso, invece, il trasporto è tipicamente diffusivo, cioè non c'è un flusso netto imposto dall'esterno, ma un gradiente di concentrazione che guida il principio attivo dai siti di adsorbimento verso l'ambiente circostante, su scale di tempo, tipicamente dell'ordine di ore o giorni, e di velocità effettiva enormemente più lente di quelle associate ad un moto convettivo forzato.

### 2.3. Filtri a carboni attivi

Per quanto riguarda le applicazioni al di fuori del campo biomedicale, la prima possibile applicazione è quella nel settore dei filtri a carboni attivi. Essi sono dispositivi di purificazione che sfruttano la proprietà adsorbente del carbone attivo per trattenere odori, vapori, gas e alcune sostanze chimiche dall'aria o dall'acqua. Il carbone attivo è un materiale di origine vegetale, spesso da legno, gusci di cocco, torba, trattato ad alte temperature in assenza di aria per creare una struttura estremamente porosa, con migliaia di micro-canali e una superficie specifica molto elevata. Di conseguenza, a differenza dei classici filtri meccanici che intrappolano particelle solide, i carboni attivi agiscono su gas, vapori e molecole odorose [34].

Gli utilizzi principali sono per:

- Cappe da cucina a ricircolo, dove l'aria aspirata non viene espulsa all'esterno, ma purificata dai filtri e reimpressa all'interno della cucina (Fig.17). In questo contesto vengono abbinate anche con filtri metallici e filtri HEPA ad alta efficienza per pollini ed allergeni.

- Impianti di ventilazione e industriali per l'abbattimento di odori, composti organici volatili e solventi.
- Trattamento delle acque tramite filtri a carbone attivo granulare o in blocco per la rimozione di cloro e clorammine, composti organici pesticidi e sottoprodotti della disinfezione. In questo caso con applicazioni sia di tipo domestico come nel caso dei filtri per le caraffe per acqua potabile, passando per gli utilizzi civili, come nel caso dei filtri a gravità delle piscine, fino a quelli industriali per la protezione delle membrane dal cloro.



Figura 17: Filtro a carboni attivi per cappa domestica

Dal punto di vista fluidodinamico, nella sostanza, un filtro a carboni attivi granulari (GAC) è un letto impaccato attraversato da un flusso di acqua o aria. Nei filtri a GAC, i microinquinanti vengono adsorbiti dal carbone attivo e dove successivamente possono anche biodegradarsi, prolungando così la vita utile del filtro. La biodegradazione può essere potenziata (Fig. 18), introducendo nei filtri microrganismi catalizzatori in grado di accelerare il processo di degradazione degli inquinanti [35].

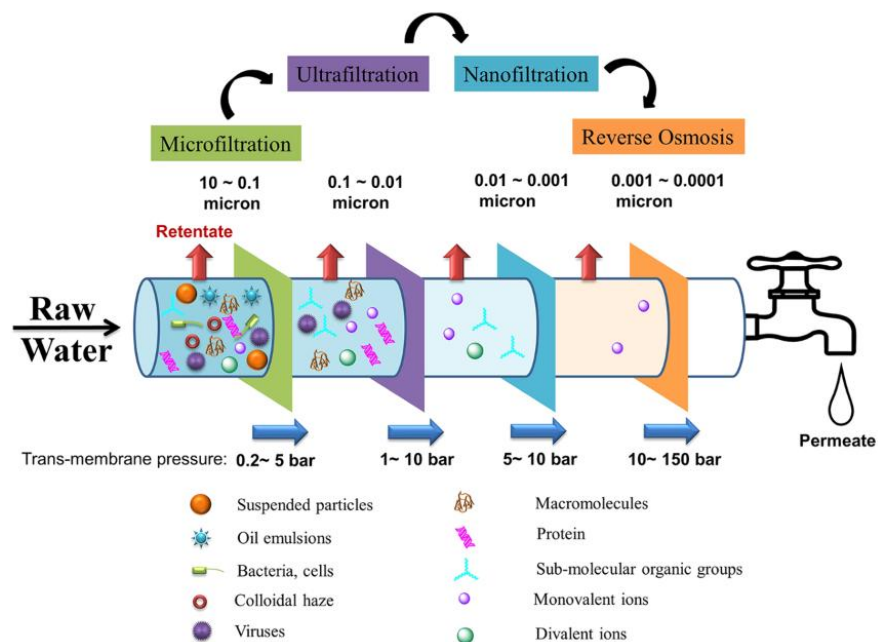


Figura 18: Schema gerarchico nel campo della filtrazione

## 2.4. Separatori Syngas e Steam Reforming

Sempre nel campo delle applicazioni industriali possiamo trovare l'applicazione di membrane di separazione per lo steam methane reforming (SMR), il processo più diffuso per la produzione di idrogeno e di gas di sintesi (syngas, miscela di  $H_2$  e  $CO$ ), ottenuto facendo reagire idrocarburi con vapore acqueo ad alta temperatura in un catalizzatore (Fig. 19). La flessibilità dell'SMR rende il processo adattabile ad una vasta gamma di applicazioni, dalla produzione di idrogeno puro alla sintesi di combustibili e chimici di base.

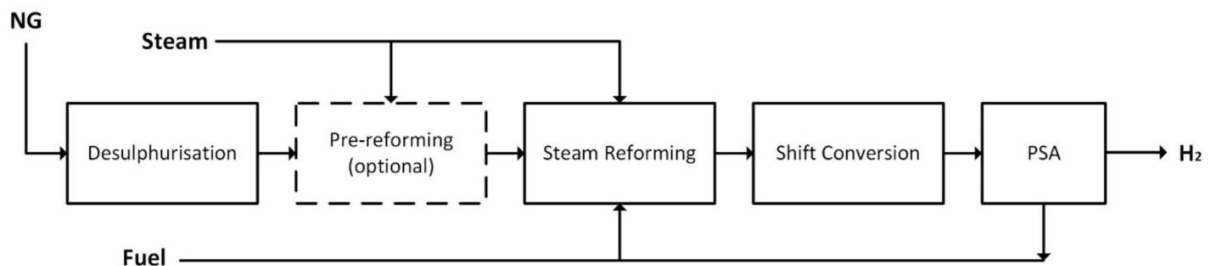


Figura 19: Schema impiantistico per lo steam reforming

Wang et al. [57], nella loro review sulle membrane inorganiche per la separazione dell'idrogeno, inquadrano

Il principio alla base dei reattori a membrana applicati a SMR è la rimozione selettiva dell'idrogeno prodotto nella zona di reazione (Fig. 20). Le membrane inorganiche (ceramiche, metalliche o composite) sono preferite in questo contesto per l'elevata stabilità termica, la resistenza meccanica e la compatibilità chimica richieste dalle temperature operative del reforming, tipicamente tra i 450 e i 900 °C [36].

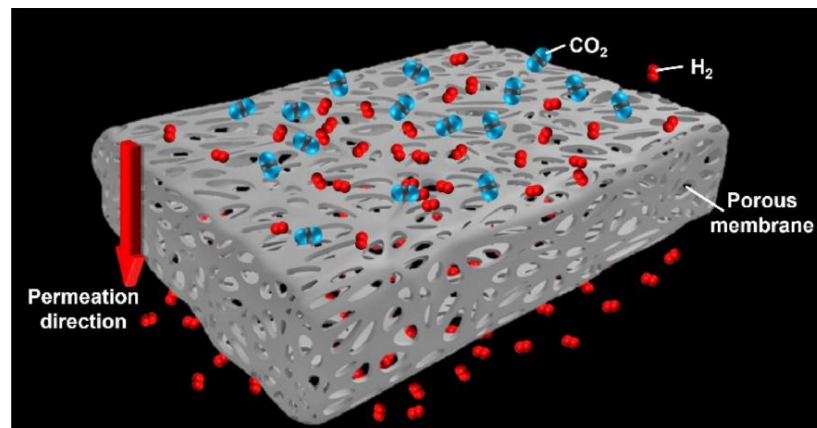


Figura 20: Processo di permeazione nello steam reforming

La struttura delle membrane composite è costituita da una struttura a tre strati a porosità decrescente: un supporto metallico poroso esterno, uno strato barriera di diffusione ceramico a due livelli depositato per dip-coating e uno strato denso e selettivo di palladio puro responsabile della permeazione dell'idrogeno [37]. Questa architettura ricalca concettualmente la gerarchia Foramen-Cribum-Cribellum che caratterizza il frustolo della

diatomea, dove analogamente la porosità decresce dall'interno del Foramen verso l'esterno del Cribrum e poi del Cribellum.

La prospettiva industriale è l'utilizzo in campo industriale di diversi settori Palo et al. [60], con un taglio più applicativo, riportano risultati di sperimentazione a livello pilota di reattori a membrana al Pd in tre ambiti industriali: produzione di idrogeno puro, produzione di combustibili sintetici tramite processi gas-to-liquid e produzione di chimici di base, tra cui il propilene [38] [39].

### 3. Il Modello

#### 3.1. Setup del problema e condizioni al contorno

Il modello di studio iniziale ha previsto l'analisi del comportamento fluidodinamico di una cella dell'Areola nella sua interezza. Il comportamento in natura della Diatomea prevede la possibilità di un attraversamento bidirezionale in fasi alterne del fluido all'interno dell'areola, con fini diversi (Fig 21). In direzione dal cribrum al foramen (direzione esterno interno), il frustolo agisce da filtro, assorbendo i fluidi e utilizzando cribellum e cribrum come filtro per i possibili contaminanti; viceversa, dal foramen al cribrum (direzione interno-esterno), il frustolo espelle i fluidi di scarto, andando a trattenere i nutrienti di cui l'organismo ha necessità.

Per questa analisi iniziale è sufficiente analizzare un singolo frustolo a base esagonale, a cui sono stati aggiunti dei canali a monte e valle per poter permettere lo sviluppo del flusso.

Il dominio di calcolo esagonale è stato implementato in scala 1:1 con quella delle possibili applicazioni strutturali previste nelle ricerche di Musenich et al. [40] (Fig. 22).

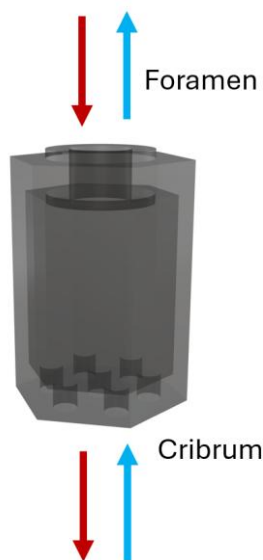


Figura 21: Direzioni del flusso

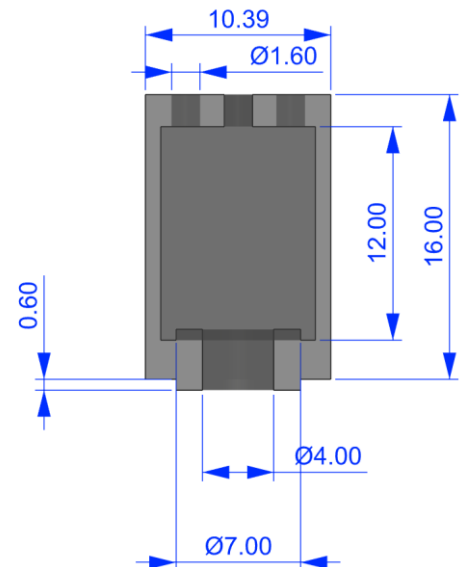


Figura 22: Dimensioni Frustolo in [mm]

Per permettere al flusso di svilupparsi il più possibile, permettendo quindi di migliorare la convergenza di calcolo delle simulazioni, si è scelto estendere i canali agli estremi di 5 volte la lunghezza del frustolo, nostro dominio di calcolo di interesse, impostando, quindi la lunghezza dei canali a 80 [mm] (Fig. 23).



Figura 23: Vista laterale del dominio di calcolo con le estensioni (in rosa) di 80 [mm] ciascuna

Per il processo di discretizzazione si è voluto rimanere sotto il milione di elementi in modo da poter lavorare anche con licenza per studenti (Fig 24 - 25). Di conseguenza gli unici infittimenti della mesh sono stati eseguiti nelle zone di interesse, per poter catturare la

presenza di fenomeni caratteristici. Le due zone di infittimento hanno previsto un infittimento interno alla diatomea a partire da 0,5 [mm] e un infittimento esterno alla diatomea a partire da 1 [mm], con in entrambi i casi un fattore di crescita pari a 1,2 (Fig. 26). Inoltre, sono stati inseriti 10 prism layer per avere una corretta risoluzione dello strato limite a parete con un valore di  $y^+ < 1$ .



Figura 24: Vista laterale della mesh del canale

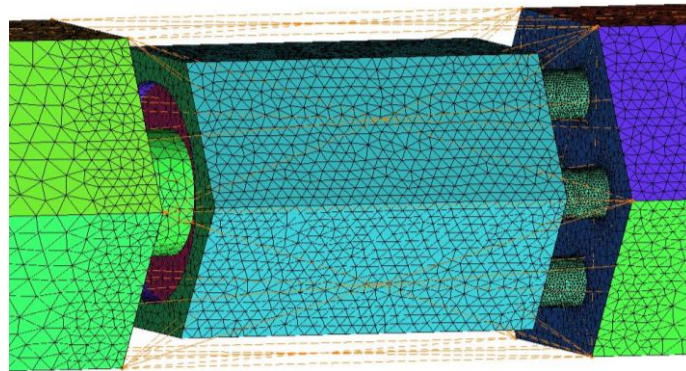


Figura 25: Vista 3D della mesh

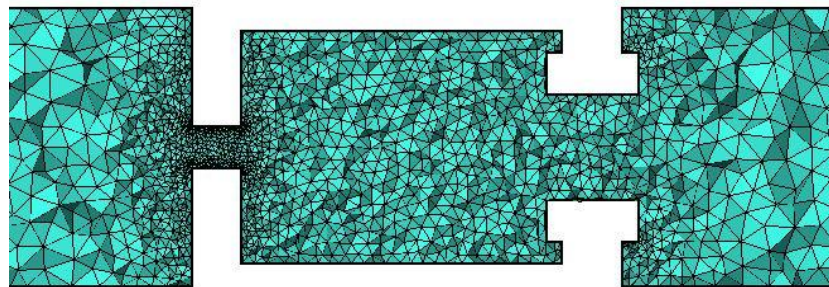


Figura 26: Struttura prismatica della mesh volumetrica interna

Il problema è stato analizzato nelle due direzioni di attraversamento del fluido, ma per ottenere dei risultati comparabili, sono state impostate le stesse condizioni al contorno. La pressione di riferimento è stata impostata a 1 [atm], alle pareti è stata impostata la condizione di no-slip, temperatura totale in ingresso condotto 300 [K], pressione relativa all'outlet del condotto 0 [atm], di conseguenza pari alla pressione pari a quella di riferimento. Per alleggerire il processo di computazione è stato impostato la periodicità transizionale alle pareti del dominio. Infine, come modello di calcolo è stato selezionato il  $k-\omega$  SST total energy e come fluido di lavoro acqua. Come primo parametro di interesse per analizzare la caduta di pressione, sia statica ( $\Delta p$ ) che totale ( $\Delta p_t$ ), si è voluto selezionare la velocità di ingresso nel condotto ( $V_{in}$ ).

### 3.2. Confronto Risultati

I risultati numerici hanno mostrato come le maggiori perdite di pressione, in particolare di natura totale, si presentino nel caso in cui il flusso vada dal Foramen verso il Cribrum. Il Foramen convoglia la portata in una vena ad alta velocità che non ha spazio per redistribuirsi

o uniformarsi prima di raggiungere la faccia opposta, avendo solo 12 mm di lunghezza interna per svilupparsi. Questo fa sì che la contrazione locale, seguita dalla rapida espansione nei sette fori del Cribrum, provochi dei fenomeni di separazione e ricircolo intenso, maggiori rispetto al caso opposto. In questo secondo caso, da Cribrum a Foramen, il fluido proveniente dal Cribrum risulta già frammentato all'interno della diatomea (Fig. 27 - 28)

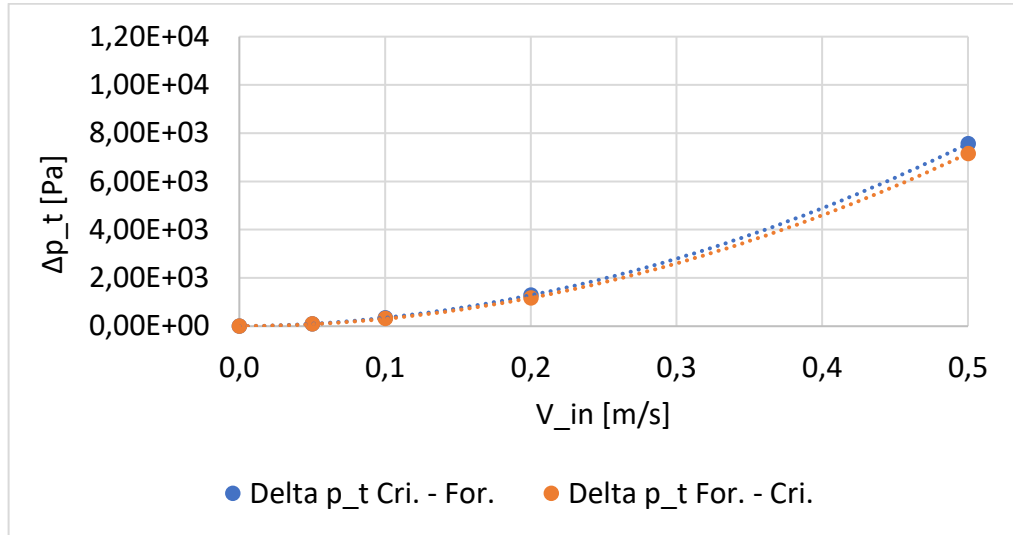


Figura 27: Caduta di pressione totale in funzione della velocità in ingresso

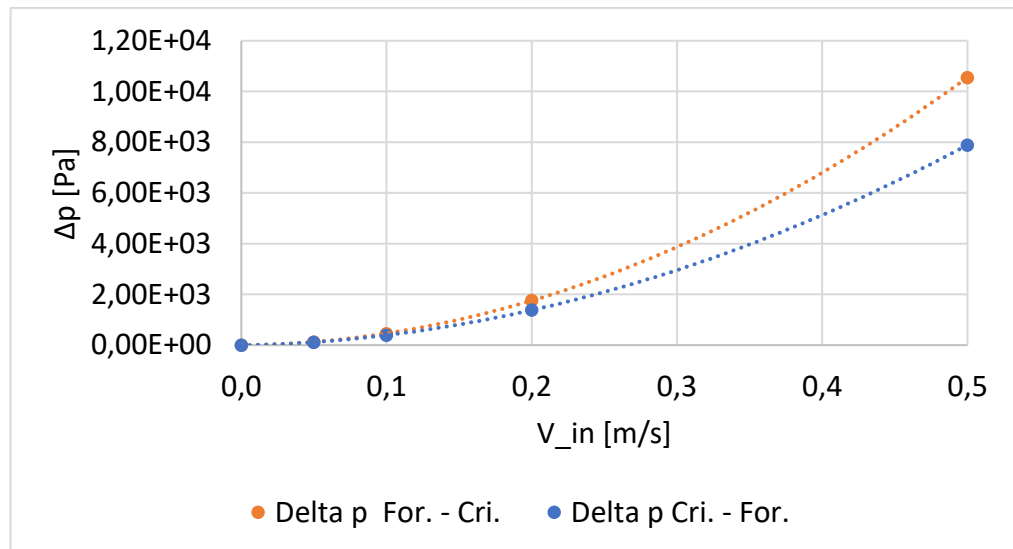


Figura 28: Caduta di pressione statica in funzione della velocità in ingresso

### 3.2.1. Da Foramen a Cribrum

#### 3.2.1.1. Velocità in ingresso 0,2 [m/s]

L'ingresso lato Foramen induce ad una grossa scia di valle assialsimmetrica (Fig. 29 - 30) che inizialmente non è soggetta a fenomeni di cavitazione, ma nel momento in cui raggiunge la parete del Cribrum, porta alla formazione di zone di forte ricircolo interno (Fig. 19).

Questo passaggio del flusso da un estremo all'altro dell'Areola provoca una caduta di pressione statica ( $\Delta p_t = p_{t_{in}} - p_{t_{out}}$ ) di 1763,88 [Pa] e una caduta di pressione totale ( $\Delta p_t = p_{t_{in}} - p_{t_{out}}$ ) di 1169,93 [Pa]. La differenza tra le due cadute di pressione  $\Delta p - \Delta p_t$  indica un aumento di energia cinetica tra ingresso e uscita. Poiché l'area totale del Cribrum è maggiore di quella del Foramen, il fluido subisce un'espansione complessiva che abbassa la pressione statica media. Tuttavia, la velocità nelle singole aperture del Cribrum rimane elevata e non uniforme.

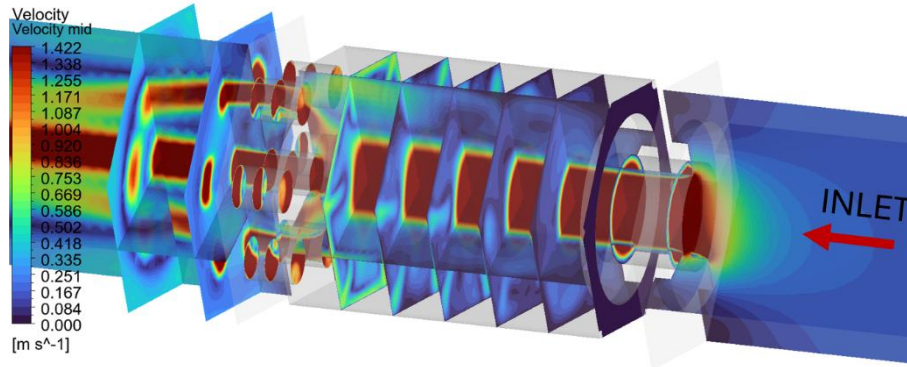


Figura 29: Contour di velocità da Foramen a Cribrum

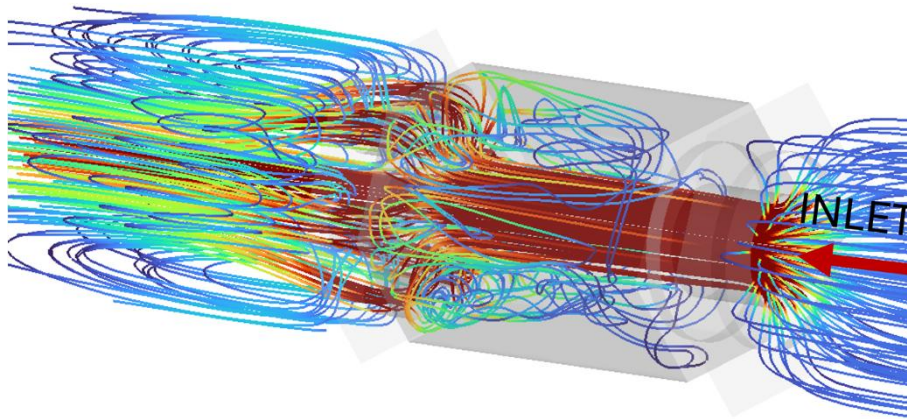
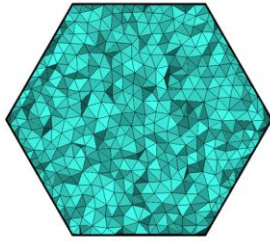


Figura 30: Streamline di velocità da Foramen a Cribrum

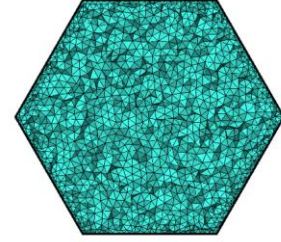
### 3.2.1.2. Velocità in ingresso 0,5 [m/s]

Alle velocità più alte si osserva una perdita di dettaglio nella zona interna e a valle del Cribrum, imputabile ad una mesh troppo grossolana o a fenomeni instazionari. Per verificarlo sono state definite tre mesh di confronto: Mesh 1 da 850k elementi, Mesh 2 da 2,7M elementi e Mesh 3 da 1,97M elementi come caso intermedio, con infittimenti interno/esterno rispettivamente di 0,5/1 mm, 0,2/0,45 mm e 0,3/0,7 mm (Fig. 31).

Mesh 1: 850k elementi



Mesh 3: 1.97M elementi



Mesh 2: 2.7M elementi

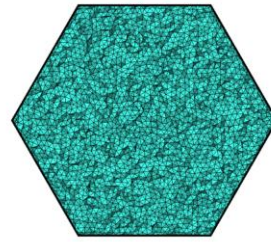


Figura 31: Confronto visivo mesh 1, mesh 2 e mesh 3

Per questo caso di maggiore velocità all'inlet, dove è attesa un'elevata turbolenza, sono stati confrontati un modello turbolento  $k-\omega$  SST (intensità 5%), su Mesh 1 (Fig. 32) e Mesh 2 (Fig. 33); mentre il modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re\theta_t$ ) è stato utilizzato solo su Mesh 2 (Fig. 34).

I risultati mostrano come una mesh più rada introduca rumore numerico e sovrastimi il contributo dinamico dissipativo, a causa dell'elevato gradiente presente all'interno della diatomea e a valle di essa giustificando la scelta di una mesh più affinata (Tab. 1).

| Modello                                       | $\Delta p_t$ [Pa] | $\Delta p$ [Pa] |
|-----------------------------------------------|-------------------|-----------------|
| Turbolenza 5% (mesh 1)                        | 7151,07           | 10554,70        |
| Turbolenza 5% (mesh 2)                        | 8930,91           | 10590,80        |
| Transizione $\gamma - Re_{\theta_t}$ (mesh 2) | 8761,12           | 9722,42         |

Tabella 1: Risultati caduta di pressione

La prova con modello di transizione per mesh più 'affinata' è stata condotta se pur il numero di Re non suggerisca l'applicazione di tale modello in quanto presente nella regione di flusso turbolento. Tale simulazione ha permesso di valutare come il modello di transizione preveda una intensità di turbolenza minore all'interno della Diatomea rispetto al modello di turbolenza. I contour di velocità 2D confermano che i due modelli danno risultati simili, con una lieve differenza nell'intensità di turbolenza prevista, mentre l'affinamento della mesh migliora sensibilmente la risoluzione a valle del Cribrum.

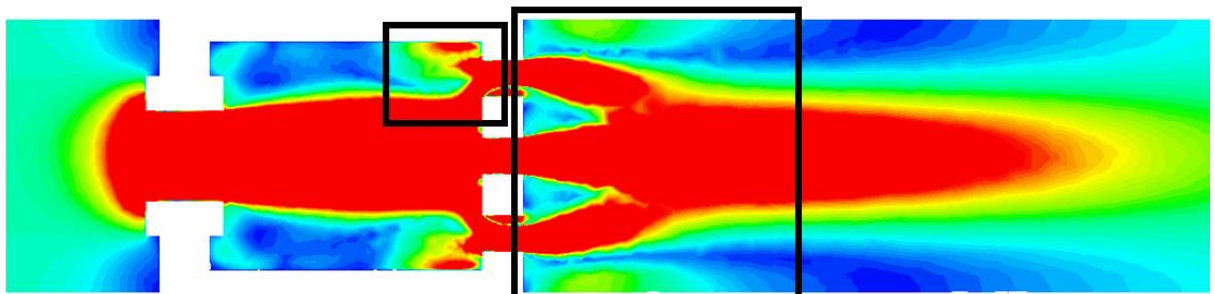


Figura 32: Contour di velocità mesh 1 modello turbolento  $k-\omega$  SST (intensità 5%)

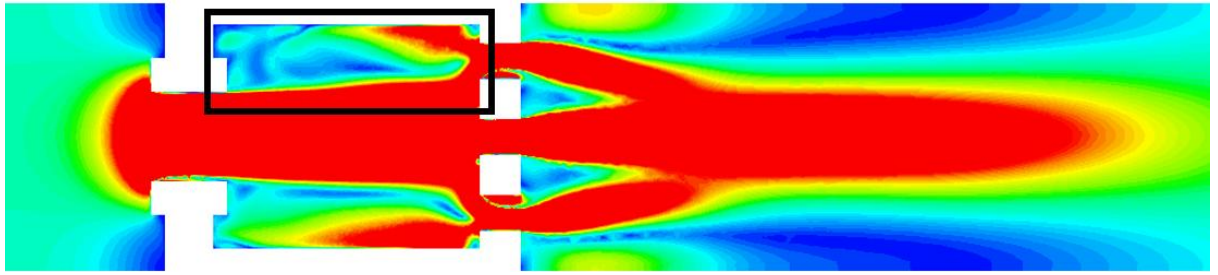


Figura 33: Contour di velocità mesh 2 modello turbolento  $k-\omega$  SST (intensità 5%)

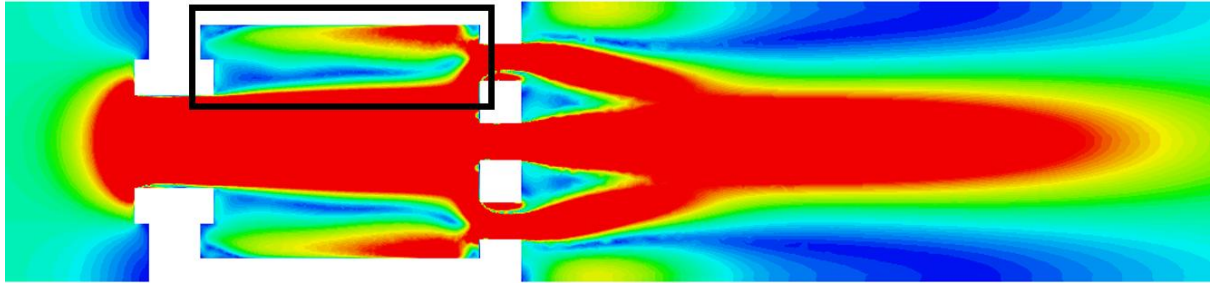


Figura 34: Contour di velocità mesh 2 modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re\theta t$ )

la visualizzazione volumetrica 3D conferma che il modello di transizione produce una struttura di flusso più ordinata (Fig. 35) rispetto al modello turbolento. L'utilizzo di una mesh più 'grossolana' (Fig. 36) prevede un comportamento differente rispetto ad una mesh più fine (Fig. 37), data soprattutto da un valore di  $\Delta p - \Delta p_t$  maggiore rispetto alle altre configurazioni e pertanto sintomo di un contributo dinamico dissipativo maggiore all'interno della diatomea.

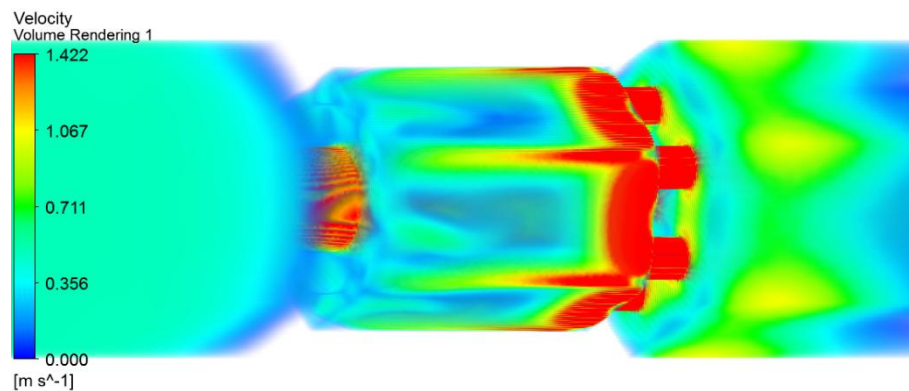


Figura 35: Contour di velocità 3D mesh 2 modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re\theta t$ )

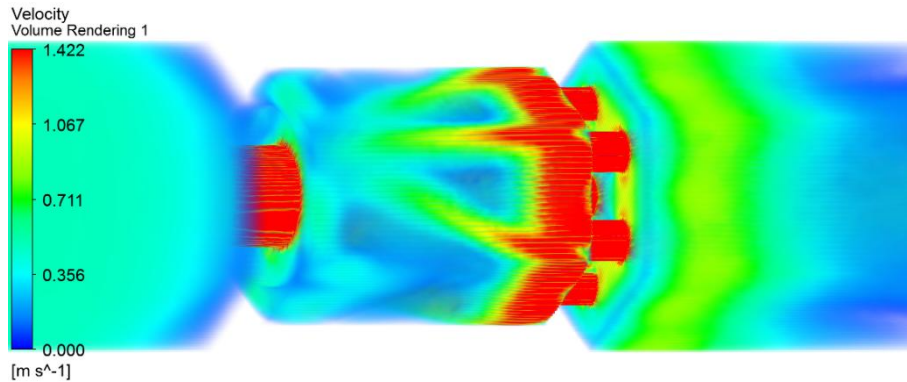


Figura 36: Countour di velocità 3D mesh 1 turbolento  $k-\omega$  SST (intensità 5%)

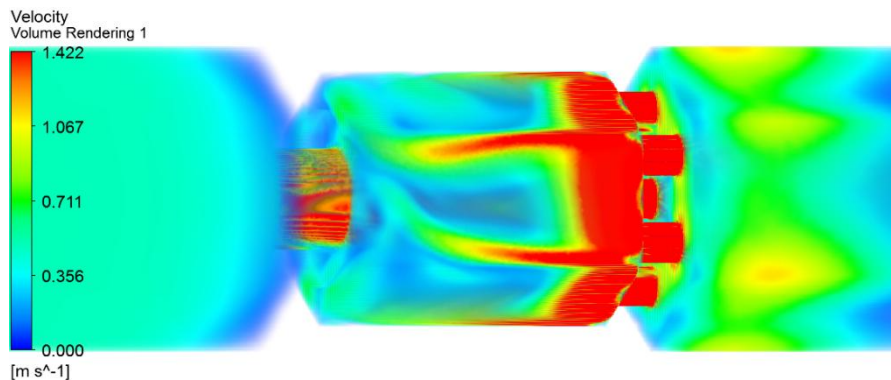


Figura 37: Countour di velocità 3D mesh 2 turbolento  $k-\omega$  SST (intensità 5%)

### 3.2.2. Da Cribrum a Foramen

#### 3.2.2.1. Velocità in ingresso 0,2 [m/s]

In questa direzione la struttura di flusso interna è diversa dal caso precedente, poiché il flusso arriva già frammentato dall'ingresso del Cribrum (Fig. 38 – 39); quando il core flow raggiunge la parete del Foramen si innescano zone di ricircolo interne più contenute rispetto al caso opposto. I valori numerici confermano una caduta di pressione statica  $\Delta p = 1388,25$  [Pa] e totale  $\Delta p_t = 1287,56$  [Pa]: poiché l'area d'ingresso è maggiore di quella d'uscita, il fluido subisce una contrazione che aumenta la velocità media nel Foramen, convertendo parte della caduta di pressione statica in pressione dinamica.

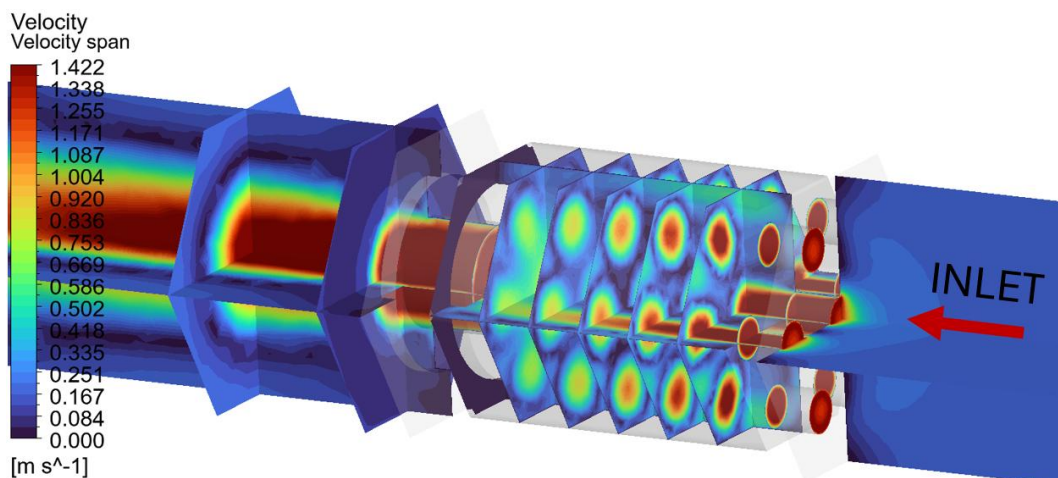


Figura 38: Contour di velocità da Cribrum a Foramen

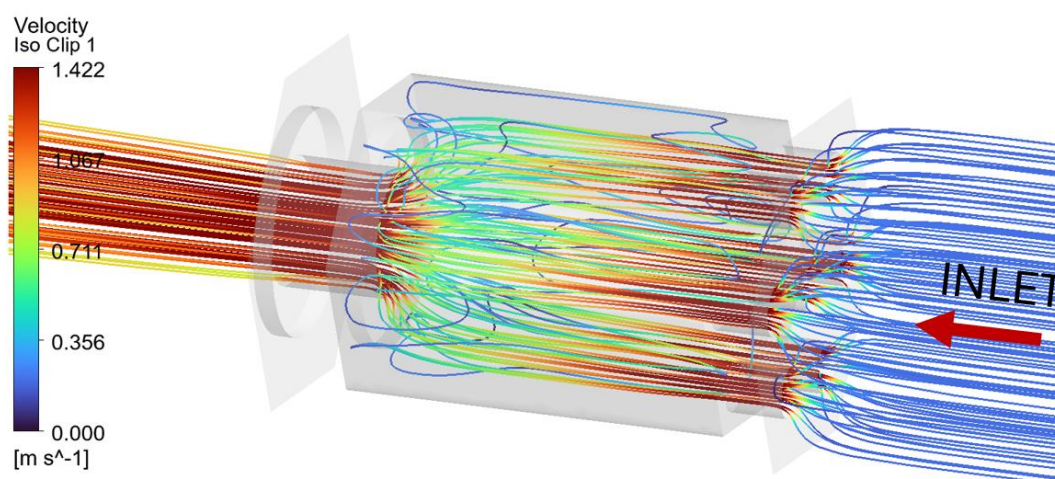


Figura 39: Streamline di velocità da Cribrum a Foramen

### 3.2.2.2. Velocità in ingresso 0,05 [m/s]

A questa velocità ridotta, come nel caso inverso, il flusso non risulta completamente turbolento in tutte le regioni del dominio, rendendo nuovamente necessario un confronto su tre modelli:

- Laminare;
- Modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re_{\theta t}$ );
- Modello turbolento  $k-\omega$  SST (intensità 5%).

I risultati di  $\Delta p$  e  $\Delta p_t$  per i tre modelli (Tab. 2), calcolati su Mesh 1 e Mesh 2, mostrano differenze contenute a parità di mesh, anche se il numero di Reynolds varia in base alla posizione, passando da un regime laminare a uno di transizione.

| Modello                                       | $\Delta p_t$ [Pa] | $\Delta p$ [Pa] |
|-----------------------------------------------|-------------------|-----------------|
| Laminare (mesh 2)                             | 91,18             | 111,09          |
| Transizione $\gamma - Re_{\theta t}$ (mesh 2) | 91,63             | 112,66          |
| Turbolenza 5% (mesh 2)                        | 93,74             | 112,92          |
| Transizione $\gamma - Re_{\theta t}$ (mesh 3) | 91,03             | 110,55          |
| Turbolenza 5% (mesh 1)                        | 97,48             | 109,08          |

Tabella 2: Risultati caduta di pressione

Dal confronto dei contour di velocità emerge che il modello laminare (Fig. 40) produce una struttura di flusso fortemente asimmetrica e anomala, poiché si trova a operare in un intervallo di Reynolds intermedio, non adatto a tale modello, che porta all'allungamento della scia di valle. Il modello turbolento (Fig. 41) porta ad una notevole riduzione della scia; mentre il modello di transizione, infine, mostra una configurazione simile su entrambe le mesh testate (Fig. 42 – 43), con una risoluzione solo leggermente diversa per quanto riguarda lo spessore.

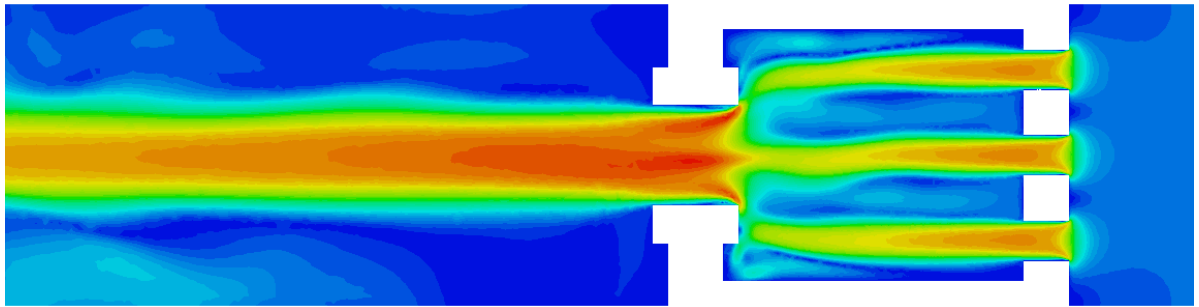


*Figura 40: Contour di velocità mesh 2 modello laminare*

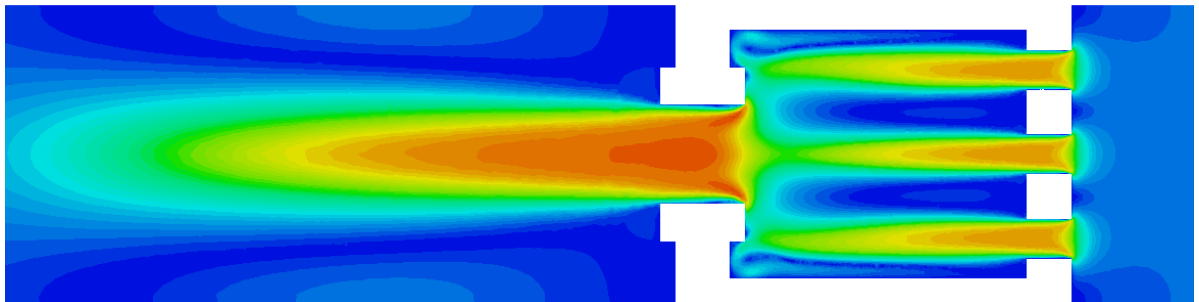


*Figura 41: Contour di velocità mesh 1 modello turbolento  $k-\omega$  SST (intensità 5%)*

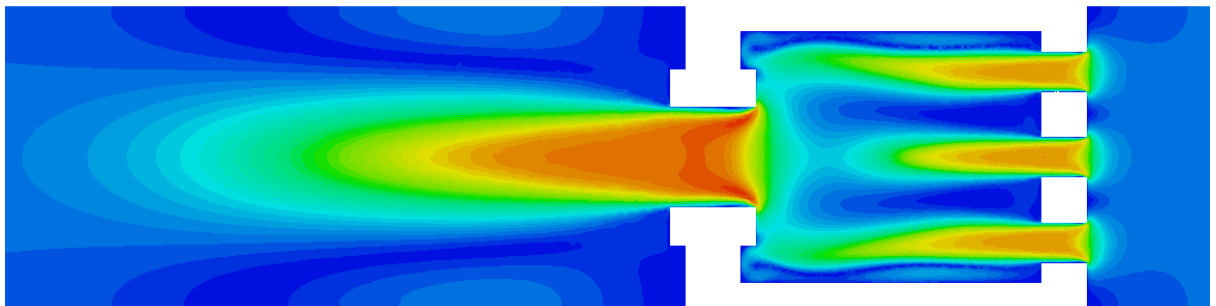


*Figura 42: Contour di velocità mesh 2 modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re_{\theta t}$ )*

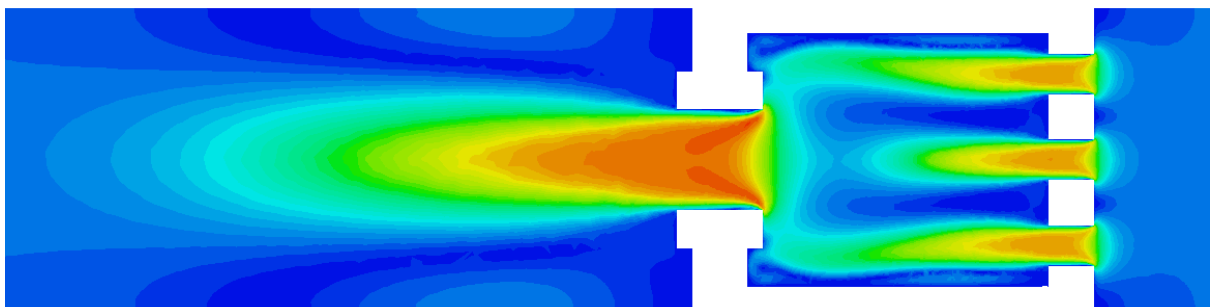


*Figura 43: Contour di velocità mesh 3 modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re_{\theta t}$ )*

L'analisi delle streamline 3D conferma che il modello laminare (Fig. 44) non risolve in modo ottimale la struttura di flusso; mentre il modello turbolento (Fig. 45) la descrive meglio, mantenendo una configurazione simmetrica e mettendo in evidenza forti zone di ricircolo. Anche in questa analisi la migliore risoluzione è data dal modello transizionale (Fig. 46), che mette in luce i forti ricircoli che si creano all'interno della struttura.

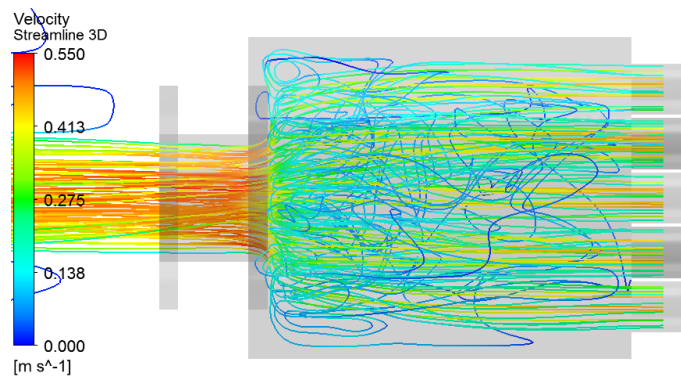


Figura 44: Streamline 3D modello laminare

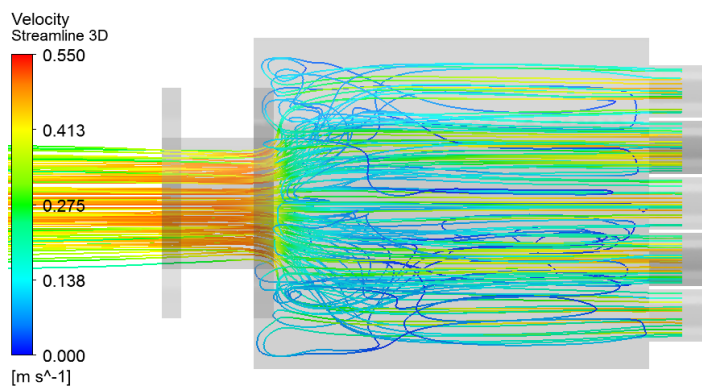


Figura 45: Streamline 3D modello turbolento  $k-\omega$  SST (intensità 5%)

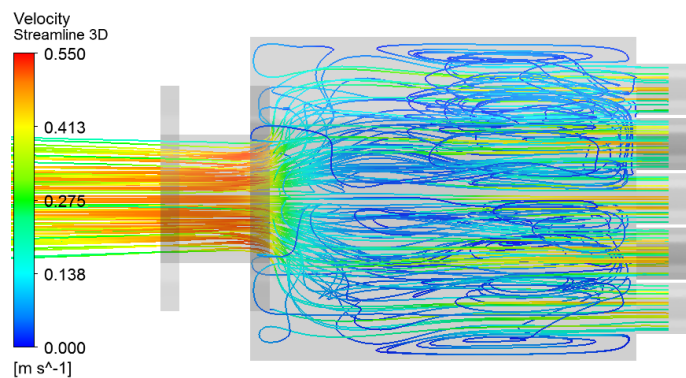


Figura 46: Streamline 3D modello transizionale

### 3.3. Analisi DPM (Discrete Phase Method)

Il Discrete Phase Model consente di risolvere separatamente la fase continua (fluido), tramite le equazioni di Navier–Stokes, e di tracciare in modo Lagrangiano il moto di un numero discreto di particelle rappresentative. Applicato al trasporto e filtraggio di microparticelle PET, il modello calcola le forze di trascinamento (drag), la gravità, le forze di pressione, l'effetto della turbolenza e gli impatti elastici/anelastici con aderenza superficiale, tenendo conto della distribuzione dimensionale e della densità delle particelle, oltre che delle condizioni d'ingresso.

Le particelle PET sono caratterizzate da un diametro variabile che segue una distribuzione gaussiana, le cui dimensioni minima e massima sono 0,03 [mm] e 0,3 [mm] (Fig. 47).

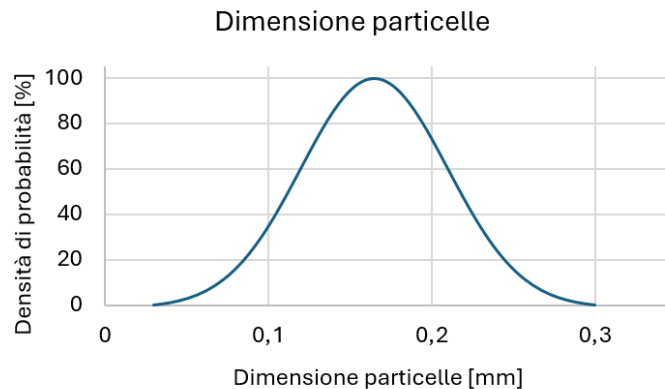


Figura 47: Distribuzione gaussiana diametro delle particelle

Le simulazioni sono state condotte parametricamente al variare del numero di particelle iniettate, da 50 a 250 con step di 50, con iniezione uniforme e posizioni random; alle pareti della diatomea sono stati imposti coefficienti di restituzione (perpendicolare e parallelo) pari a 1; il coefficiente di restituzione permette di impostare il valore di elasticità di collisione delle particelle sulle pareti, impostandolo pari ad 1 si ipotizzano urti perfettamente elastici.

Dal confronto delle curve di perdita al variare del numero di particelle emerge una variazione complessiva contenuta al crescere della carica particellare (Tab. 3): le particelle PET modificano il campo di moto soprattutto in ingresso e nelle sette uscite del Cribrum, inducendo deviazioni, separazioni e piccoli ricircoli locali.

La perdita totale cresce in modo più regolare rispetto alla componente statica, che presenta fluttuazioni non monotone, segno di una sensibilità dell'energia cinetica alle ridistribuzioni locali del flusso indotte dalle particelle (Fig. 48).

| $N_{particle_{in}}$ | $\Delta p_t [Pa]$ | $\Delta p [Pa]$ |
|---------------------|-------------------|-----------------|
| 0                   | 8930,91           | 10590,80        |
| 50                  | 9088,18           | 10920,80        |
| 100                 | 9203,04           | 10863,60        |
| 150                 | 9202,29           | 11052,00        |
| 200                 | 9301,83           | 10990,20        |
| 250                 | 9326,48           | 10993,90        |

Tabella 3: Caduta di pressione

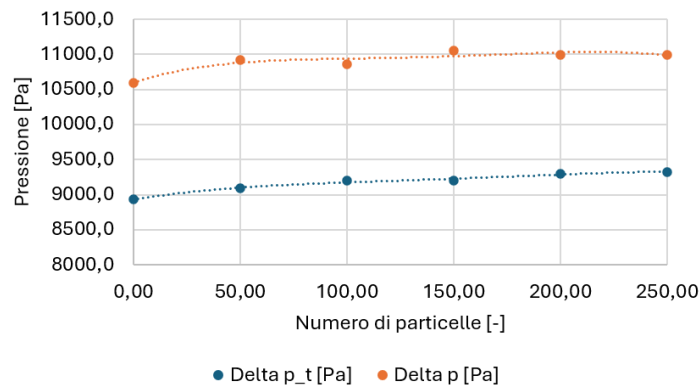


Figura 48: Andamento caduta di pressione

Il tempo di attraversamento medio delle particelle, calcolato dal Foramen al Cribrum, mostra un tempo minimo pressoché costante ( $\sim 0,015$  s), mentre il tempo massimo cresce sensibilmente con il numero di particelle, fino a 0,115 s per 250 particelle (Tab. 4). Si può osservare come il tempo medio di residenza sia pressoché costante, indipendentemente dal numero di particelle iniettate. In particolare, si è andati a verificare il tempo di residenza per 50 particelle e si nota come il tempo di residenza di quasi tutte rimanga nell'intorno del tempo medio un valore, con solo pochi valori out-layer (Fig.49).

Per quanto il tempo di residenza risulti estremamente esiguo, bisogna sottolineare le grandezze in gioco in questa analisi, con un tempo di attraversamento 50 [cm/s] in un corpo lungo appena 1,2 [cm].

| $N_{particle_{in}}$ | $N_{particle_{out}}$ | Tempo massimo [s] | Tempo minimo [s] | Tempo medio [s] |
|---------------------|----------------------|-------------------|------------------|-----------------|
| -                   | -                    |                   |                  |                 |
| 50                  | 49                   | 0,017             | 0,015            | 0,015           |
| 100                 | 92                   | 0,044             | 0,015            | 0,016           |
| 150                 | 138                  | 0,022             | 0,015            | 0,015           |
| 200                 | 198                  | 0,022             | 0,015            | 0,015           |
| 250                 | 234                  | 0,115             | 0,015            | 0,016           |

Tabella 4: Tempo di residenza

La traiettoria seguita dalla particella non è caratterizzata da molti ricircoli e turbolenze (Fig.50), ma si può osservare un leggero accumulo delle particelle a monte del Frustolo prima di entrare nel Foramen (Fig. 51).

L'istogramma della distribuzione dei tempi per 250 particelle (Fig. 52) conferma che la quasi totalità delle particelle attraversa il sistema rapidamente, mentre una minoranza rimane intrappolata più a lungo a causa di turbolenze locali.

Sul piano del campo di moto, un numero ridotto di particelle (50) non altera sensibilmente la struttura di flusso rispetto al caso senza particelle (Fig. 53 – 54), mentre un numero elevato (250) (Fig. 55) produce variazioni non significative sul campo interno ma un effetto visibile sull'estensione del getto a valle, che risulta più intenso e prolungato.

Un maggior numero di particelle iniettate, inoltre, ostacola l'uscita dal foro centrale e aumenta il tempo di residenza di quelle riciclonanti, come visibile nelle visualizzazioni con

fattore di ingrandimento x2 e intervalli temporali di 0,025 [s]; nonostante ciò, una volta entrata, la particella non subisce l'influenza di questo accumulo iniziale, mantenendo una traiettoria caratterizzata da poche perturbazioni (Fig. 56).

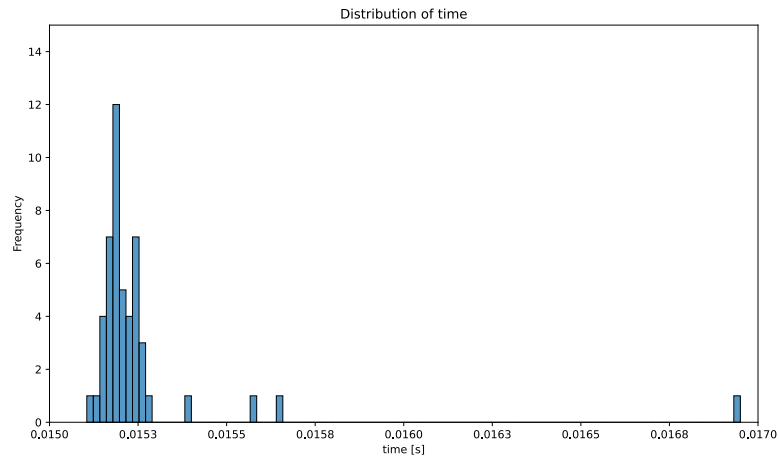


Figura 49: Istogramma tempi di residenza per iniezione di 50 particelle

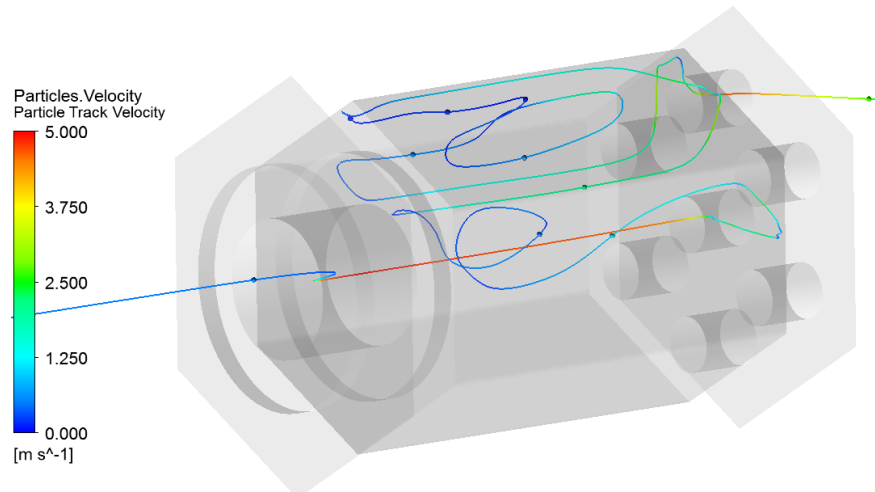


Figura 50: Tracciamento percorso da una singola particella nel percorso Foramen-Cribrum

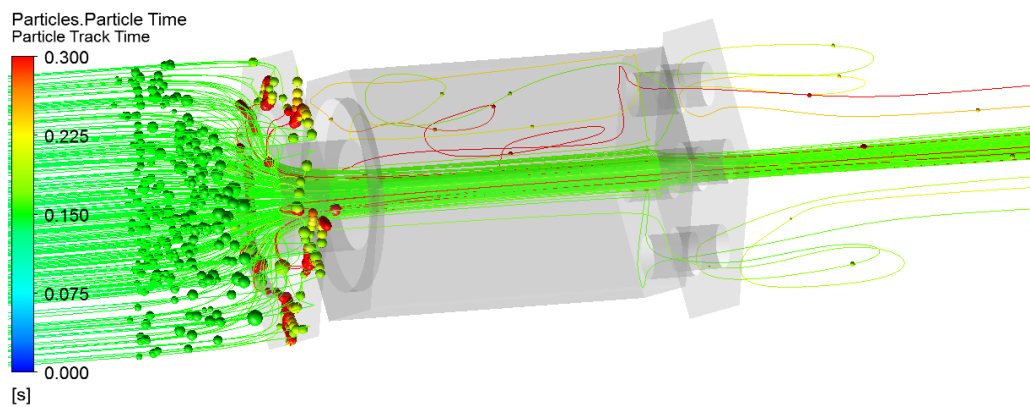


Figura 51: Deposito particelle all'ingresso del Foramen per 150 particelle iniettate

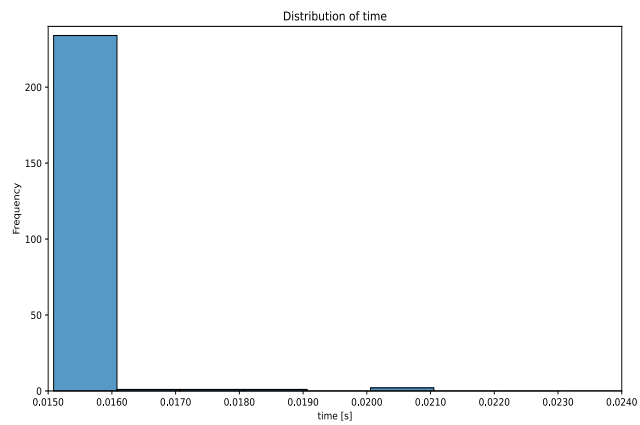


*Figura 52: Istogramma tempo di residenza - dimensioni particella*

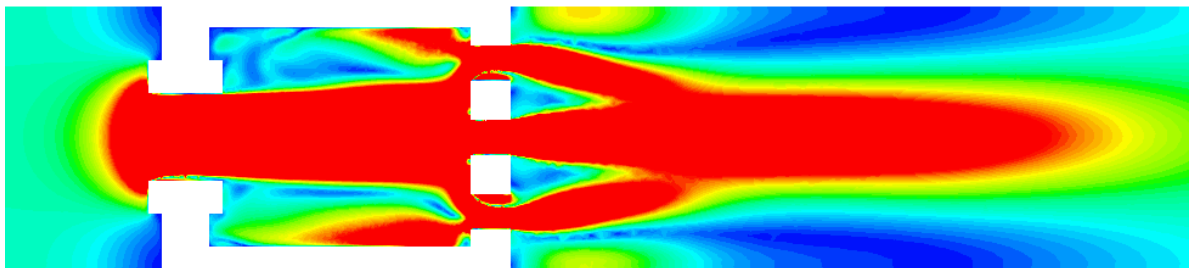


*Figura 53: Contour velocità senza iniezione di particelle*

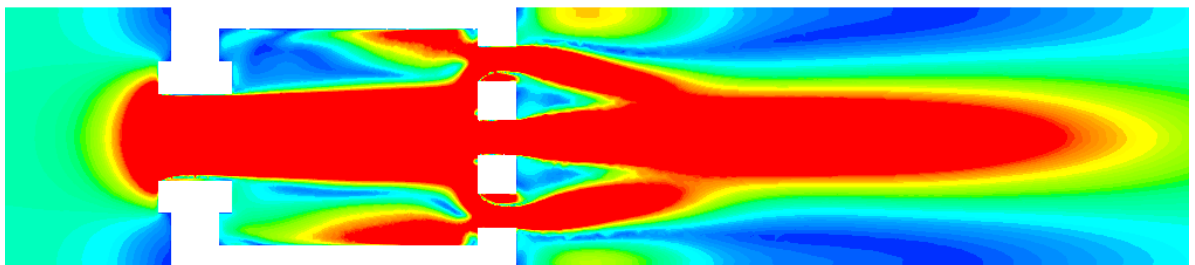


*Figura 54: Contour velocità con iniezione di 50 particelle*

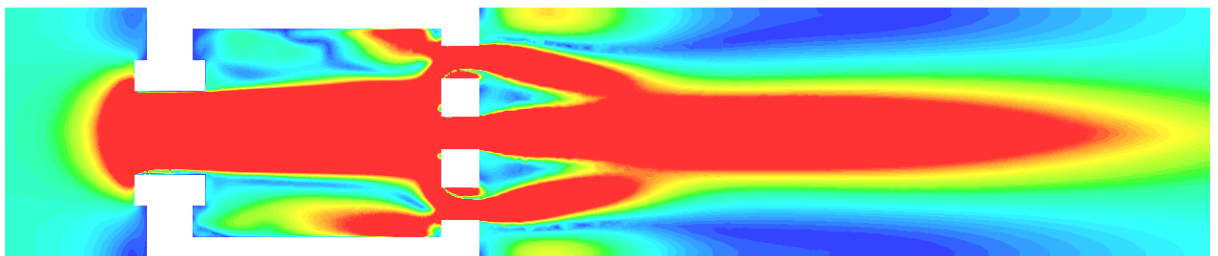


*Figura 55: Contour velocità con iniezione di 250 particelle*

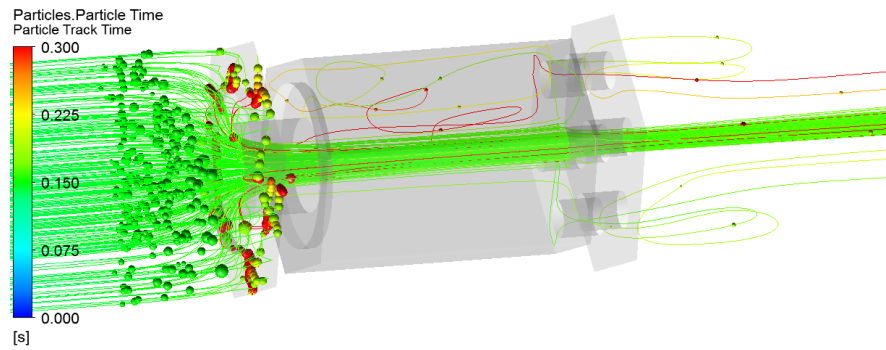


Figura 56: Deposito particelle all'ingresso del Foramen per 250 particelle iniettate

Nella direzione opposta, da Cribrum a Foramen, l'analisi sul tempo di residenza è stata eseguita a parità di particelle (250) con variazione di velocità all'ingresso del Cribrum (Tab. 5). Rispetto al caso a più bassa velocità (0,05 [m/s]), l'andamento del tempo di residenza medio ha un andamento non monotono, con un iniziale decremento, seguito da un incremento per la velocità più alta analizzata (0,5 [m/s]), probabilmente dovuti ad iterazioni sempre più complesse tra le particelle, dovute all'elevata quantità di moto.

| $V_{in}$ [m/s] | $N_{particle_{in}}$ | $N_{particle_{out}}$ | Tempo massimo [s] | Tempo minimo [s] | Tempo medio [s] | Variazione t. medio [%] |
|----------------|---------------------|----------------------|-------------------|------------------|-----------------|-------------------------|
| 0,05           | 250                 | 235                  | 0,148             | 0,015            | 0,024           |                         |
| 0,1            | 250                 | 250                  | 0,085             | 0,015            | 0,019           | -17,753                 |
| 0,2            | 250                 | 249                  | 0,118             | 0,015            | 0,018           | -8,006                  |
| 0,5            | 250                 | 246                  | 0,086             | 0,015            | 0,025           | 37,496                  |

Tabella 5: Caduta di pressione al variare della velocità in inlet a parità di particelle iniettate

Per le velocità inferiori a 0,5 [m/s] è stato adottato il modello di transizione, poiché alle basse velocità le particelle risentono maggiormente dell'effetto della gravità.

In questa direzione di attraversamento, si osserva una forte ricircolazione delle particelle iniettate, causato probabilmente dalla necessità dei sette flussi in ingresso a miscelarsi in uno unico di uscita (Fig. 57 – 58).

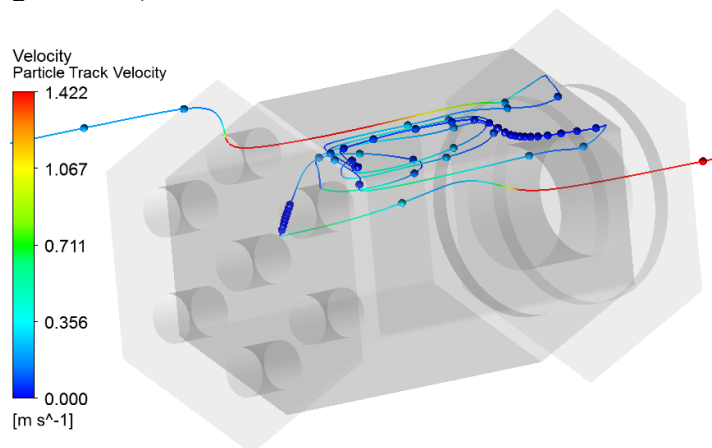


Figura 57: Tracciamento percorso da una singola particella nel percorso Cribrum- Foramen

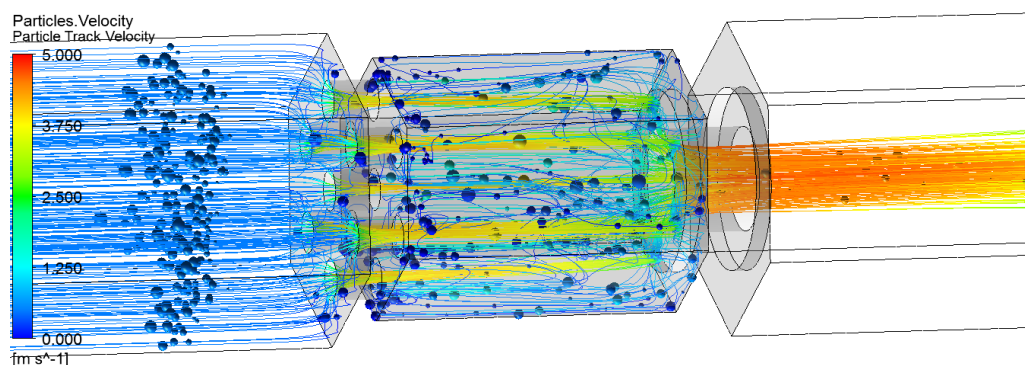


Figura 58: Tracciamento del miscelamento delle particelle con streamline di velocità

Rispetto al caso precedente (flusso da Foramen a Cribrum) si nota come, a parità di particelle iniettate (Fig. 59), le variazioni di  $\Delta p$  [Pa] risultino maggiori, passando da un 3.81% ad un 5.07%; al contrario le variazioni di  $\Delta p_t$  [Pa] risultano più contenute passando da un 4.43% ad un 0.12% (Tab. 6).

| $N_{particle_{in}}$ | $\Delta p_t$ [Pa] | Variazione $\Delta p_t$ [%] | $\Delta p$ [Pa] | Variazione $\Delta p$ [%] |
|---------------------|-------------------|-----------------------------|-----------------|---------------------------|
| 0                   | 7565,88           |                             | 7886,51         |                           |
| 250                 | 8920,61           | +0,12%                      | 10053,70        | +5,07%                    |

Tabella 6: Variazioni caduta di pressione in funzione del numero di particelle iniettate

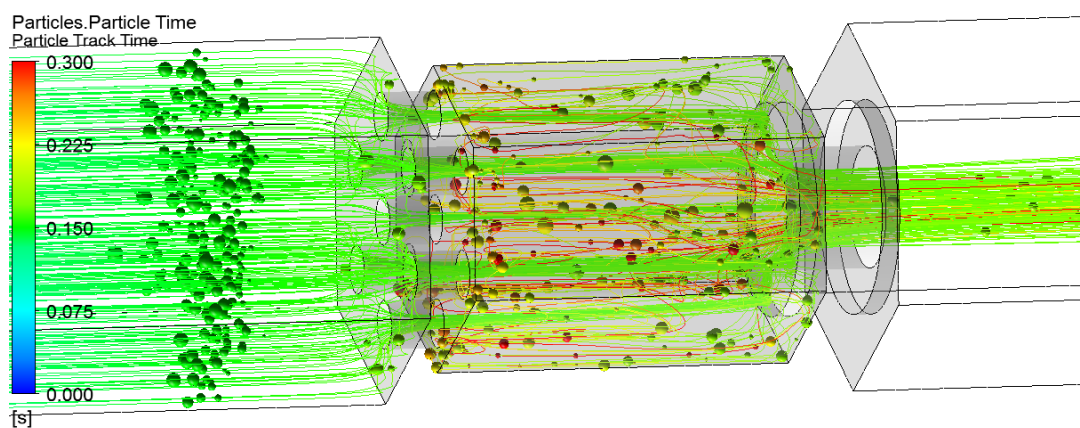


Figura 59: Tracciamento del miscelamento delle particelle con streamline di tempo

### 3.4. Influenza della geometria dei raccordi

La prima implementazione dello studio è stata volta al tuning geometrico, proponendosi di confrontare le prestazioni fluidodinamiche della geometria della diatomea, attraverso l'introduzione di raggi di raccordo all'interno della geometria stessa, sempre analizzando le due direzioni di flusso contrapposte (Fig.60).



*Figura 60: Frustolo con raccordi*

L'introduzione di un raccordo permette di andare a simulare delle condizioni più realistiche, poiché, nella realtà, non si hanno spigoli perfettamente vivi (Fig. 61); di conseguenza, sarà sempre presente un raccordo, anche solo di dimensioni contenute, a causa del processo produttivo di stampa 3D.

Nella configurazione con raccordo è stato inserito un raggio di raccordo di 0,32 mm, pari al 20% del diametro di un foro del Cribrum, in sostituzione degli spigoli vivi della geometria originale. Per quanto riguarda le mesh di calcolo, nella geometria senza raggio di raccordo la mesh utilizzata conta circa 2,7 milioni di elementi, con una zona di infittimento interna alla diatomea di dimensione 0,2 mm e una zona esterna di dimensione 0,45 mm; mentre nella geometria con raggio di raccordo, che richiede un maggiore infittimento locale, la mesh conta circa 4,5 milioni di elementi, a causa della necessità del meshatore di seguire la curvatura della geometria (Fig 61 – 62 – 63 – 64).

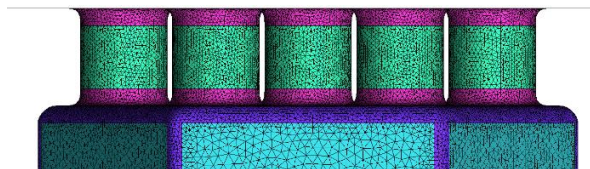


*Figura 61: Dettaglio 1 raccordo Cribrum*

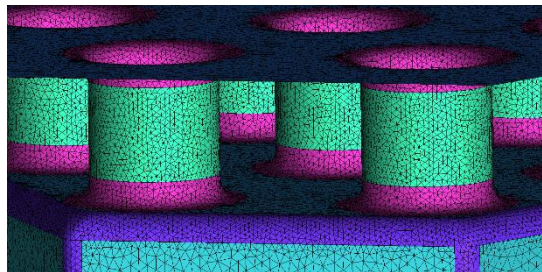


*Figura 62: Dettaglio 2 raccordo Cribrum*

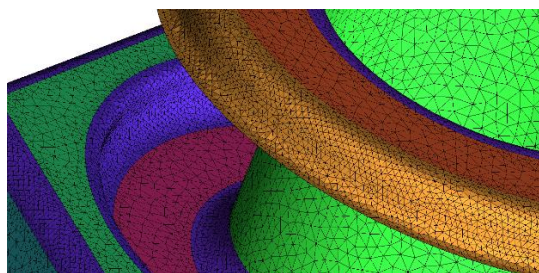


Figura 63: Dettaglio 1 raccordo Foramen

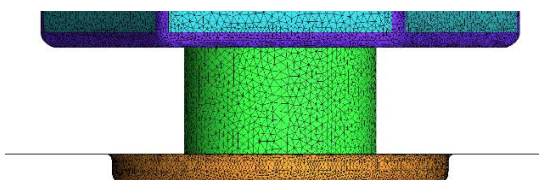


Figura 64: Dettaglio 2 raccordo Foramen

Riguardo alle condizioni al contorno, nel caso di flusso da Cribrum a Foramen sulla geometria senza raccordo si è imposta una pressione di riferimento di 1 [atm], pareti della diatomea con condizione no-slip, velocità all'inlet di 0,05 [m/s] e temperatura totale di 300 [K], mentre all'outlet a pressione relativa media di 0 [Pa]. Sulle pareti del dominio è stata imposta la condizione di periodicità traslazionale e come fluido di lavoro è stata mantenuta l'acqua, e un confronto tra il modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re\theta t$ ). Successivamente si è voluto portare la velocità in ingresso a 0,005 [m/s], imponendo quindi il modello di calcolo il modello laminare, data la bassa velocità in ingresso che non garantisce flusso completamente turbolento in tutte le regioni del dominio, mantenendo per il resto impostazioni analoghe.

Dal confronto tra i due modelli geometrici, a parità di  $v_{in} = 0,05$  [m/s], è risultato che la perdita di carico totale ( $\Delta p_t$ ) nel caso di assenza di raccordo è pari a 91,63 [Pa], mentre, introducendo il raccordo, è sceso a 72,98 [Pa] (Tab. 7). Anche nel caso della caduta di pressione statica, il modello con configurazione senza raccordo ha presentato valori di  $\Delta p$  maggiori rispetto al caso con raccordo: 112,66 [Pa] per quello senza raccordo a fronte di 85,68 [Pa] per quello raccordato. Quindi, l'inserimento del raggio di raccordo, mantenendo inalterate le condizioni al contorno, si traduce in una significativa diminuzione delle perdite di carico, che possono essere ricondotte alla presenza di spigoli vivi.

| Modello                              | $\Delta p_t$ [Pa] | $\Delta p$ [Pa] |
|--------------------------------------|-------------------|-----------------|
| $v_{in} = 0.05$ [m/s] senza raccordo | 91,63             | 112,66          |
| $v_{in} = 0.05$ [m/s] con raccordo   | 72,98             | 85,68           |

Tabella 7: Caduta di pressione

Nel caso a  $v_{in}$  pari a 0,05 [m/s], direzione Cribrum-Foramen, dal punto di vista qualitativo, la struttura del flusso all'interno della diatomea e in uscita dal Foramen presentano differenze notevoli. Con numeri di Reynolds compresi tra 2300 e 4000, il modello di transizione  $\gamma-Re\theta t$  si è dimostrato particolarmente efficace nel descrivere questi fenomeni; l'introduzione dei raggi di raccordo ha comportato una significativa riduzione delle perdite di carico, con

la pressione totale che scende da 91,63 a 72,98 [Pa], poiché il passaggio a curvature dolci riduce le turbolenze e produce un flusso più uniforme, un aspetto rilevante dato che le turbolenze elevate comportano maggiori dissipazioni energetiche (Fig 65 – 66).

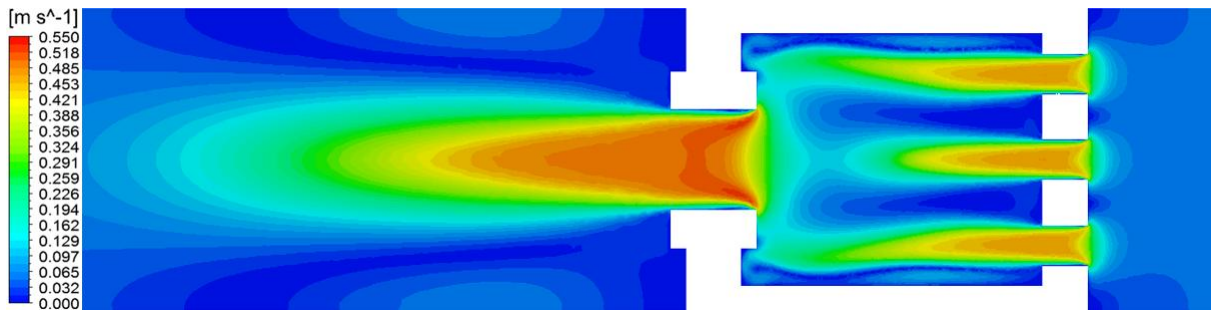


Figura 65: Contour velocità senza raccordo

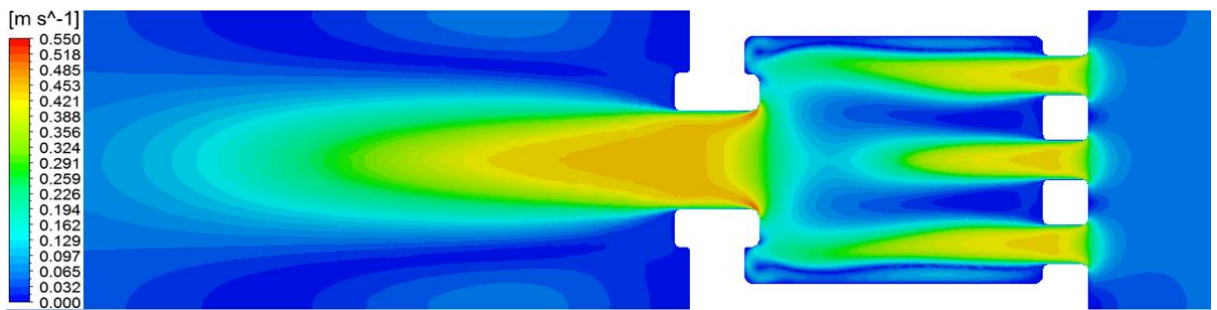


Figura 66: Contour velocità con raccordo

A velocità ridotta (0,005 [m/s]), nella geometria con raccordo e con flusso sempre da Cribrum a Foramen, la struttura di flusso osservata mantiene una buona coerenza con quella a velocità più elevata, mostrando un buon ordine legato alla suddivisione del flusso durante il passaggio attraverso il Cribrum. Inoltre, l'introduzione dei raggi di raccordo si rivela vantaggiosa sia in fase di contrazione sia di espansione del flusso attraverso i fori; nonostante questi miglioramenti, però, permangono elevate vorticità interne (Fig. 67).

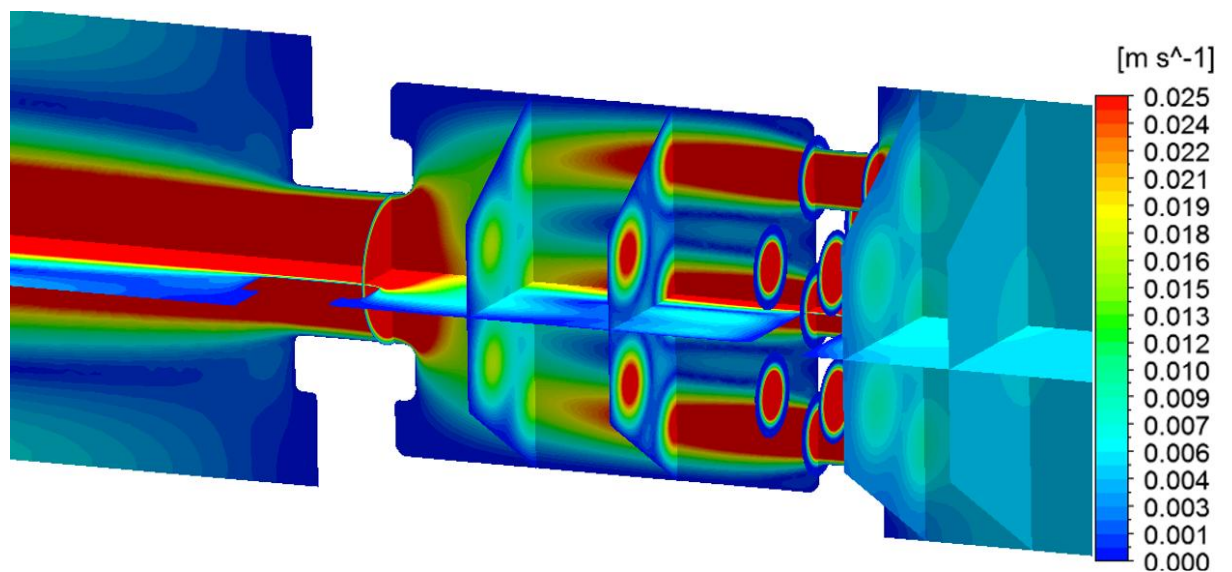


Figura 67: Countur di velocità 2D nello spazio

Anche per il caso di flusso invertito, dal Foramen verso il Cribrum, con geometria raccordata, sono state analizzate due velocità in ingresso: 0,05 [m/s] e 0,005 [m/s]. Mantenendo le altre condizioni al contorno pari a quelle del caso precedente. Data l'elevata velocità del fluido in alcune configurazioni si sperimenta un'elevata turbolenza, per cui caso sono stati confrontati il modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re\theta t$ ) e il modello laminare.

Nel caso di flusso invertito, da Foramen a Cribrum, con  $v_{in}$  pari a 0,05 [m/s] sulla geometria senza raccordo, la perdita di carico totale  $\Delta p_t$  risulta pari a 98,63 [Pa], mentre nella geometria con raccordo è di 76,14 [Pa] con il modello transizionale citato precedentemente. Anche la caduta di pressione statica segue questa tendenza, con la caduta relativa al caso senza raccordo maggiore al caso con raccordo, 104,63 [Pa] a fronte di 77,45 [Pa] (Tab. 8).

| Modello                                          | $\Delta p_t$ [Pa] | $\Delta p$ [Pa] |
|--------------------------------------------------|-------------------|-----------------|
| $v_{in} = 0.05$ [ $\frac{m}{s}$ ] senza raccordo | 98,63             | 104,63          |
| $v_{in} = 0.05$ [ $\frac{m}{s}$ ] con raccordo   | 76,14             | 77,45           |

Tabella 8: Confronto caduta di pressione con o senza raccordo

Rispetto al caso privo di raccordo, in cui la caduta di pressione  $\Delta p$  è molto simile tra i due modelli confrontati, con variazioni percentuali intorno al 22,80%, l'introduzione del raccordo aumenta la variazione percentuale di  $\Delta p$  fino a circa il 25,98%, il che non è solo più rappresentativo della geometria reale, ma introduce anche l'effetto benefico del raggio di raccordo, che riduce le perdite di carico rendendo il flusso più omogeneo, meno soggetto a turbolenze e complessivamente più efficiente.

Infine, nel caso  $v_{in}$  molto basse, pari a 0,005 [m/s], sulla geometria con raccordo si osservano oscillazioni del flusso a valle del Cribrum, nonostante il basso numero di Reynolds. Queste oscillazioni, che potrebbero essere causate da vortici che si distaccano dalla superficie, possono generare instabilità nel flusso e una distribuzione non uniforme della velocità. Utilizzando un modello laminare, in cui il flusso si muove in strati paralleli senza mescolamento, si osserva come le oscillazioni potrebbero derivare dall'interazione del flusso con la geometria, che può innescare la formazione di vortici anche a basse velocità, contribuendo a turbolenze locali.

Dalle Fig. 68 e Fig. 69 si può osservare come a più alte velocità di ingresso il flusso rimanga maggiormente simmetrico con una scia di minore lunghezza; al contrario, a più basse velocità la scia riesce a mantenersi per una lunghezza maggiore ma viene caratterizzata da alcune perturbazioni che ne alterano la simmetria assiale.

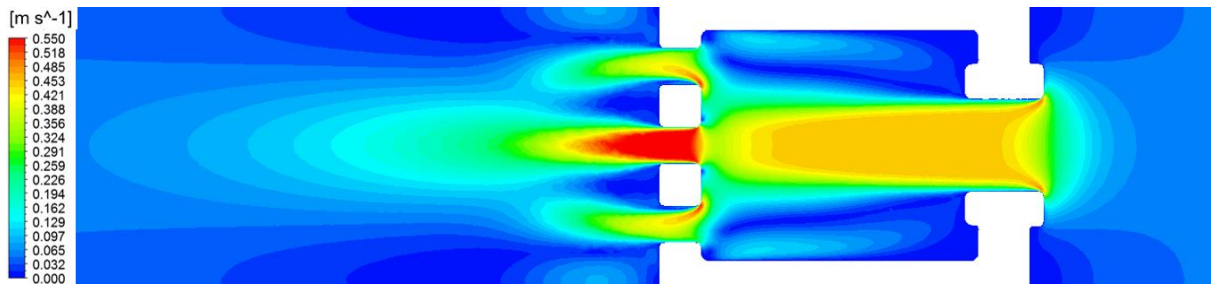


Figura 68:  $V_{in} = 0,5 \text{ m/s}$ :

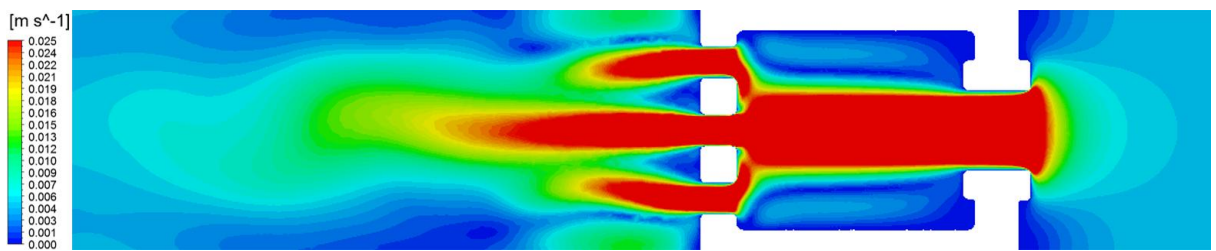


Figura 69:  $V_{in} 0,005 \text{ m/s}$ :

Complessivamente, i risultati confermano che l'introduzione di un raggio di raccordo di 0,32 [mm] nella geometria della diatomea riduce in modo significativo le perdite di carico dovute agli spigoli vivi in entrambe le direzioni di flusso analizzate; inoltre, che il modello di turbolenza più adatto varia in funzione della velocità in ingresso e va scelto a seguito di una verifica del numero di Reynolds, con il modello laminare più idoneo alle velocità più basse e il modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re\theta t$ ) più adatto ai regimi a Reynolds più elevato. Infine, si sottolinea come l'introduzione di un raccordo risulti in una omogeneizzazione del flusso attraverso i fori, nonostante la permanenza di vorticità interne significative, specialmente a basse velocità, dove si osservano oscillazioni di flusso a valle del Cribrum.

### 3.5. Influenza della geometria del frustolo

Un'ulteriore analisi si propone di confrontare le prestazioni fluidodinamiche a seguito della modifica della geometria del Frustolo. Alla base di questo ulteriore step, c'è l'interesse nell'applicare gli innovativi approcci di machine learning (ML) per il design di nuovi materiali data-driven, al fine di sostituire le equazioni costitutive per l'analisi delle proprietà di questi nuovi materiali, identificare nuove architetture strutturali, avere un supporto nella scelta dei parametri caratteristici dei processi produttivi e migliorare le prestazioni come il limite di fatica, la resistenza al buckling e la resistenza alla frattura. Per fare ciò, a partire da un modello geometrico a spessore di parete costante, denominato benchmark, sono stati analizzati all'incirca 18.000 modelli creati tramite ML e caratterizzati da differenti gradienti di variazione di spessore di parete.

Dal dataset dei risultati ottenuti su questi modelli, a cui è stato applicato un carico di compressione, si è andati a considerare le tre casistiche di interesse: quella con le proprietà meccaniche migliori (best), peggiori (worst) e intermedie (average - AVG), in parallelo a quella "benchmark" di riferimento iniziale (Fig. 70) [41].

Le quattro geometrie di interesse sono state sottoposte ad analisi CFD con l'obiettivo di valutare una possibile correlazione multifunzionale tra le proprietà fluidodinamiche e quelle

strutturali della diatomea *Coscinodiscus*. Anche in questo caso sono stati analizzati i casi in entrambe le direzioni di attraversamento del flusso.

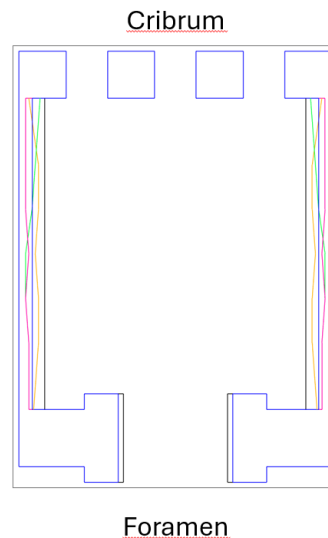


Figura 70: Geometrie del frustolo in esame

Nelle applicazioni di assorbimento e dissipazione di energia, la scelta dei materiali è spesso guidata dalla quantità di energia che per l'appunto deve essere dissipata, lo sforzo massimo che è associata o al processo di dissipazione e i limiti di peso imposti dal design del prodotto stesso. Da questi aspetti sono state quindi identificate le quattro geometrie di frustolo considerate: Best, Worst, AVG (Average – medio) e Benchmark (Fig. 71), derivanti dalle simulazioni strutturali FEM: la configurazione Best presenta le migliori proprietà meccaniche a compressione, la Worst le proprietà meccaniche più basse, la AVG rappresenta una condizione media e la Benchmark la geometria di riferimento con spessore di riferimento costante.

Le quattro geometrie differiscono per le quote dimensionali del profilo del frustolo, espresse in millimetri, pur mantenendo lo stesso diametro del Foramen di 4,40 [mm] (Fig. 72).

Le condizioni operative per l'impostazione del problema sono state mantenute uguali al caso descritto nel paragrafo (2.4), con velocità di ingresso nel canale di 0,5 [m/s], che ha portato all'utilizzo del modello di calcolo transizionale  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re\theta t$ ). La geometria selezionata è quella senza raggio di raccordo.

Nel caso di flusso da Cribrum a Foramen, i valori di perdita di carico ottenuti mostrano stabilità, con valori che oscillano moderatamente tra 67,40 [Pa] e 70,19 [Pa] per la  $\Delta p$  e tra 80,09 [Pa] e 81,47 [Pa] per la  $\Delta p_t$ . In particolare, i valori di caduta di pressione totale mostrano come la variazione di geometria del frustolo non generi un incremento significativo della resistenza al flusso (Tab. 9).



Figura 71: Dettaglio delle geometrie in esame

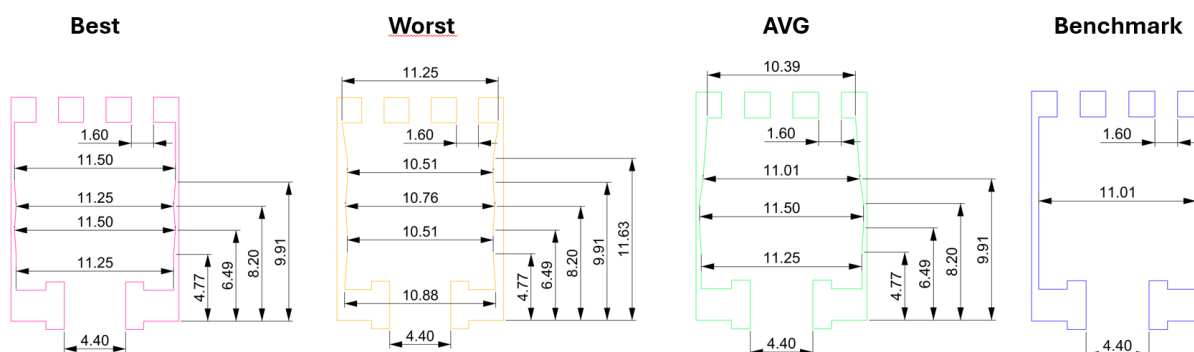


Figura 72: Dimensioni geometrie del frustolo

| Modello   | $\Delta p_t$ [Pa] | $\Delta p$ [Pa] |
|-----------|-------------------|-----------------|
| Best      | 80,26             | 67,57           |
| Worst     | 81,47             | 70,19           |
| AVG       | 80,78             | 67,40           |
| Benchmark | 80,09             | 67,87           |

Tabella 9: Confronto cadute di pressione in funzione della geometria

Dal punto di vista fluidodinamico la configurazione Worst presenta cadute di pressione maggiori rispetto agli altri casi; mentre, tra i valori registrati, il caso AVG presenta le prestazioni migliori. Pur mantenendosi complessivamente simile la struttura di flusso interno per le varie configurazioni geometriche analizzate, si osserva come il contributo maggiormente influenzato sia la zona di ricircolazione interna: in particolare la geometria del frustolo nel caso AVG, che presenta la minor caduta di pressione, riduce il gradiente di pressione sviluppato a valle del Cribrum, mentre al contrario la configurazione Worst comporta un aumento delle zone di ricircolazione.

Nella Fig. 73 il dettaglio delle scie di flusso causate dalle diverse geometrie. Dall'analisi dei vettori velocità, nella configurazione AVG (Fig. 74) si nota una certa uniformità, mentre nella configurazione Worst (Fig. 75) i vettori presentano una maggiore intensità orientata in direzione opposta al flusso principale, il che indica un significativo contributo all'inversione

del flusso, evidenziando come le due configurazioni generino dinamiche di flusso leggermente diverse.

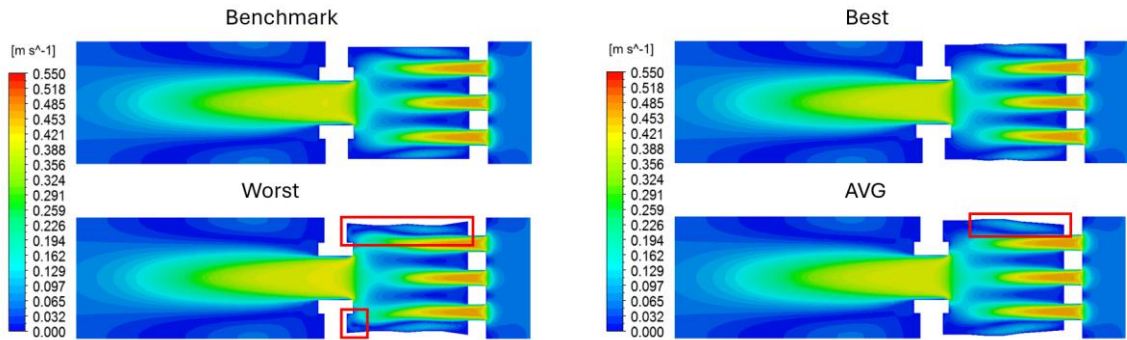


Figura 73: Dettaglio scie nelle diverse configurazioni geometriche, caso da Cribrum a Foramen

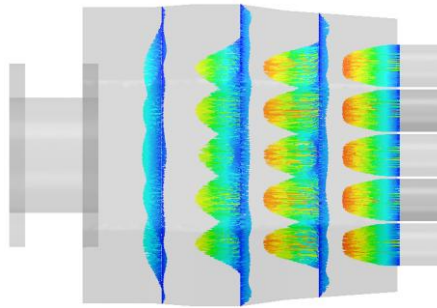


Figura 74: vettori velocità caso AVG

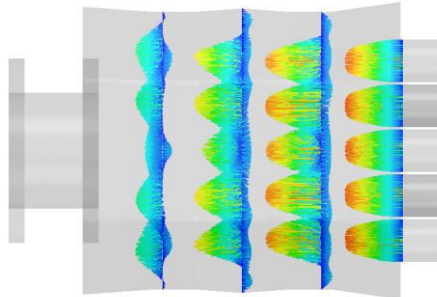


Figura 75: vettori velocità caso worst

Nel caso di flusso invertito, da Foramen a Cribrum, analogamente al caso precedente i valori ottenuti mostrano una stabilità sia per quanto riguarda la  $\Delta p$ , che oscillano tra 75,09 [Pa] e 75,52 [Pa], che per la  $\Delta p_t$ , tra 108,04 [Pa] e 110,41 [Pa] (Tab. 10).

Contrariamente al caso precedente, si osserva come la geometria Best sia quella che produce la caduta di pressione maggiore; mentre il caso Worst sia quello con la minore.

| Modello   | $\Delta p_t$ [Pa] | $\Delta p$ [Pa] |
|-----------|-------------------|-----------------|
| Best      | 75,36             | 110,41          |
| Worst     | 75,52             | 108,04          |
| AVG       | 75,09             | 109,43          |
| Benchmark | 75,17             | 108,47          |

Tabella 10: Risultati caduta di pressione per le varie tipologie di geometrie

Anche in questo caso le geometrie modificate non sembrano generare un incremento significativo della resistenza al flusso, e i valori di  $\Delta p_t$  mostrano un intervallo più ristretto rispetto al caso precedente; a conferma che le modifiche geometriche non influenzano in modo significativo la variazione della pressione totale.

Nella Fig. 76 il dettaglio delle scie di flusso causate dalle diverse geometrie.

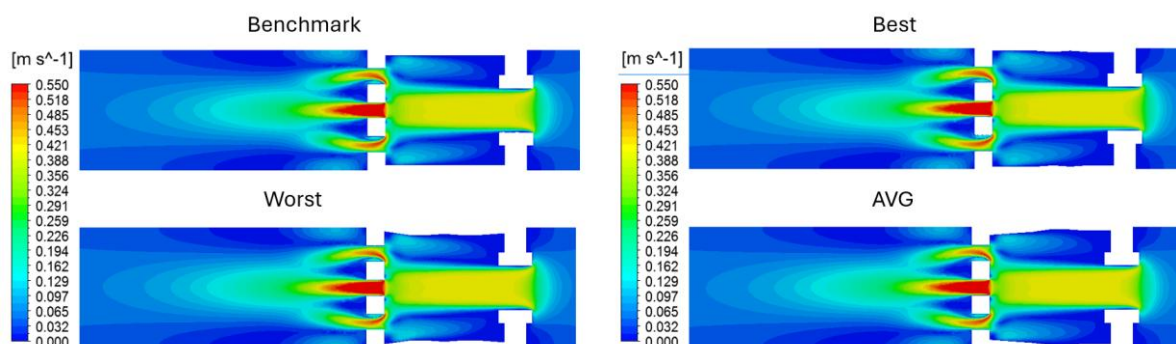


Figura 76: Dettaglio scie nelle diverse configurazioni geometriche, caso da Foramen a Cribrum

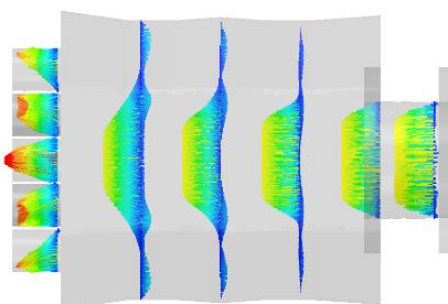


Figura 77: caso worst

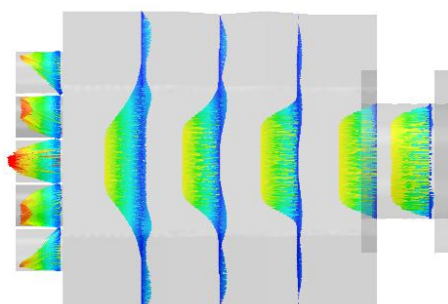


Figura 78: caso best

Rispetto al caso con flusso da Cribrum a Foramen, in cui l'analisi dei vettori aveva mostrato variazioni sulla struttura di flusso tridimensionale tra la condizione con più perdite di pressione (caso worst – Fig. 77) e quella con meno perdite (caso best – Fig. 78), in questo caso non si sono manifestate variazioni marcate di tale componente. Una possibile causa può essere data dalla conformazione della geometria AVG, che in questa direzione di flusso funge da convergente in corrispondenza della sezione di uscita del Cribrum.

Il confronto diretto con la geometria originale, indicata come Baseline, non è stato condotto, poiché il diametro del Foramen in quella configurazione risulta differente, più piccolo di 0,4 mm rispetto alle nuove geometrie. I valori di caduta di pressione statica e totale sarebbero comunque risultati maggiori nel caso di flusso proveniente dal Cribrum verso il Foramen e minori nel caso opposto. Inoltre, l'introduzione dei raggi di raccordo andrebbe a ridurre i termini di caduta di pressione, migliorando la stabilità del flusso.

La geometria definita come Worst, caratterizzata da basse proprietà meccaniche a compressione, comporta una minore caduta di pressione quando il flusso proviene dal Foramen, ma rivela prestazioni peggiori nel caso in cui il flusso provenga dal Cribrum, il che suggerisce che, sebbene la geometria Worst possa offrire vantaggi in specifiche condizioni di flusso, essa presenti limiti significativi in altre applicazioni.

La selezione della geometria del frustolo, insieme ad altri parametri geometrici, riveste dunque un'importanza fondamentale, e la definizione degli obiettivi finali risulta cruciale per valutare le esigenze del sistema, comprendere come la geometria influenzi le prestazioni in base alla direzione del flusso e individuare la configurazione geometrica più ottimale, anche nell'ottica di valutare le proprietà multifunzionali.

Rispetto alle configurazioni Baseline e Baseline con raccordo, l'analisi delle nuove geometrie evidenzia, infine, una differenza significativamente maggiore nelle cadute di pressione tra le due direzioni del flusso: nelle configurazioni Baseline la variazione della caduta di pressione, espressa come  $\Delta p$  percentuale, si attesta intorno all'8%, mentre con le nuove geometrie questa variazione supera addirittura il 50% in base ai casi esaminati. Tale analisi suggerisce che un elemento discriminante potrebbe non essere solo la geometria del frustolo, ma anche altri parametri geometrici come il diametro del Foramen (Tab. 11).

$$\text{Variazione } \Delta p = \frac{\Delta p_{\text{Cri-For}} - \Delta p_{\text{For-Cri}}}{\Delta p_{\text{Cri-For}}} * 100$$

$$\text{Variazione } \Delta p_t = \frac{\Delta p_{t \text{ Cri-For}} - \Delta p_{t \text{ For-Cri}}}{\Delta p_{t \text{ Cri-For}}} * 100$$

| Geometrie                | Variazione $\Delta p$ [%] | Variazione $\Delta p_t$ [%] |
|--------------------------|---------------------------|-----------------------------|
| Baseline_Frustule        | 7,12                      | -7,64                       |
| Baseline_Frustule_fillet | 9,61                      | -4,33                       |
| Best_Frustule            | -63,40                    | 6,11                        |
| Worst_Frustule           | -53,93                    | 7,30                        |
| AVG_Frustule             | -62,37                    | 7,04                        |
| Benchmark_Frustule       | -59,81                    | 6,15                        |

*Tabella 11: Variazione percentuale caduta di pressione per le varie tipologie di geometrie*

## 4. Il Cribellum

Nell'ottica di una più completa analisi della diatomea, si è voluto analizzare anche le capacità filtranti dovute alla presenza del Cribellum. Come anticipato nel capitolo 1, il Cribellum rappresenta lo strato più esterno della struttura; trattasi di una sottile membrana silicea, paragonabile al funzionamento epidermico della pelle, la sua struttura estremamente fitta, rappresenta la prima barriera di filtraggio rispetto l'ambiente esterno.

Dal punto di vista morfologico, il cribellum si presenta come una superficie a topografia "hillock", organizzata in cupole (domes) di circa 2 [μm] di diametro disposte secondo un impacchettamento regolare — esagonale in *Coscinodiscus* sp. e *Coscinodiscus concinnus* [42], [43], oppure pentagonale in altre specie dello stesso genere. Ogni cupola ospita un raggruppamento di poche unità porose (5–7 pori nella specie *Coscinodiscus* sp., 10–11 nella *Concinnus*), ciascuna con diametro compreso tra circa 45 nm e 225 nm a seconda della specie, e una porosità complessiva relativamente contenuta, dell'ordine del 7–8% — nettamente inferiore a quella degli strati sottostanti, dove abbiamo un 20–25% per il cribrum e un 35–37% per il foramen [42], [44]. Lo spessore del Cribellum è estremamente ridotto, generalmente inferiore ai 50 [nm], il che lo rende meccanicamente fragile: risulta infatti spesso danneggiato o completamente rimosso dai protocolli di pulizia più aggressivi (ad es. trattamento con acido solforico), mentre si conserva integro solo con metodi di pulizia più blandi [42].

Le dimensioni dei pori più piccoli del Cribellum risultano sorprendentemente minute, attestandosi in un intervallo ristretto attorno ai 40–45 [nm] in specie diverse. Questa convergenza dimensionale ha portato a ipotizzare che il Cribellum svolga la funzione di primo filtro dimensionale del sistema poroso della diatomea: una barriera meccanica capace di lasciar passare nutrienti e particelle di piccole dimensioni, escludendo al contempo agenti potenzialmente dannosi come virus e batteri, tipicamente di dimensioni superiori a questa soglia [42], [44]. Il significato funzionale della topografia a cupole, tuttavia, non è stato ancora chiarito del tutto, e sono state proposte anche ipotesi alternative legate alla raccolta della luce o al trasporto di nutrienti [42].

Proprio il ruolo ottico del cribellum ha guadagnato attenzione crescente in anni più recenti. Studi di simulazione FDTD condotti sulla struttura multistrato del frustulo hanno mostrato come la sequenza cribellum–cribrum–piastra interna si comporti come un cristallo fotonico quasi-periodico, capace di intrappolare e concentrare la luce incidente: la posizione del Cribellum come primo strato attraversato dalla radiazione luminosa (rispetto alla configurazione opposta, con la luce incidente dal lato della piastra interna) influenza in modo significativo l'assorbimento ottico complessivo della struttura, con potenziali applicazioni nel light-trapping fotovoltaico [45]

Nel complesso, il cribellum si configura quindi come uno strato multifunzionale (meccanico, filtrante e potenzialmente ottico), la cui architettura nanoporosa costituisce il punto di partenza per l'analisi condotta nel presente capitolo.

Per l'analisi è stato utilizzato il pacchetto ANSYS nella versione student dedicata ad un utilizzo di natura educativa.

Attraverso Workbench, è stato creato un modello basato sugli schemi a blocchi (Fig 79) andando ad operare in sequenza su: geometria, mesh di discretizzazione e analisi CFD del problema.

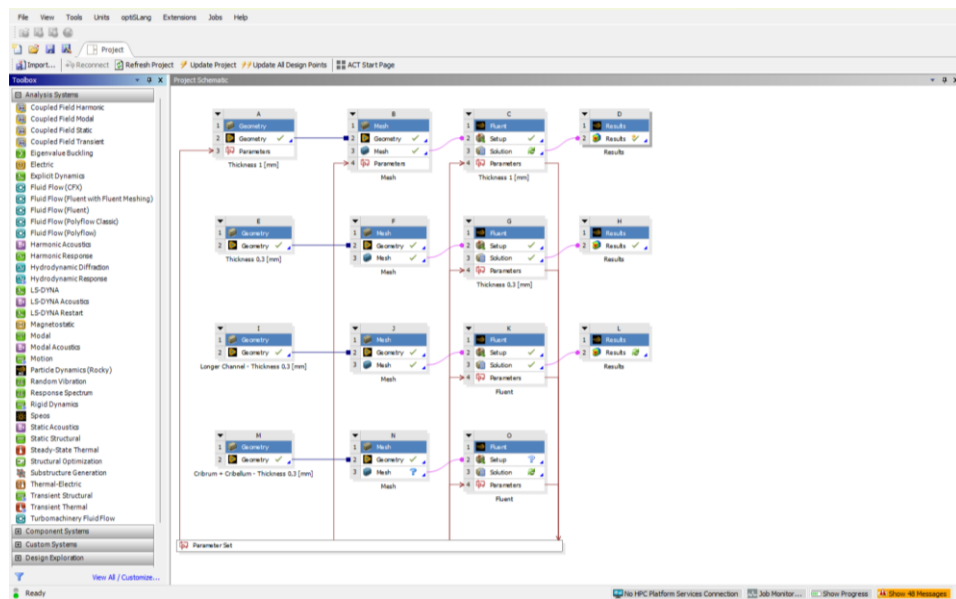


Figura 79: Interfaccia ANSYS Workbench con schema a blocchi

#### 4.1. Il modello: geometria e mesh

Per lo studio della caduta di pressione causata dal Cribellum si è optato per una geometria semplificata, in modo da isolare il comportamento fluidodinamico del solo strato poroso senza l'influenza delle caratteristiche geometriche del Frustolo, la cui analisi è oggetto del capitolo 3. Il canale computazionale è stato costruito attraverso il modellatore ANSYS SpaceClaim, in cui sono stati creati tre componenti estrusi in sequenza (Fig. 80), ciascuno con base esagonale di lato 6 [mm], scelta coerente con la successiva applicazione al modello in scala del frustolo completo:

- Primo tratto di ingresso (inlet) di 50 [mm];
- Tratto intermedio analizzato come strato poroso rappresentativo del Cribellum di 0,3 [mm];
- Tratto finale di uscita (outlet) di 50 [mm].

Poiché i tre elementi sono estrusi l'uno dall'altro mantenendo la medesima sezione esagonale, la continuità geometrica e la conformità della mesh alle interfacce risultano garantite per costruzione.

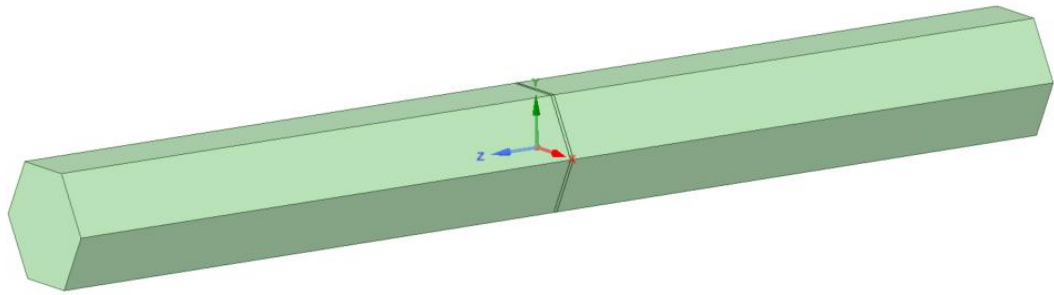


*Figura 80: Geometria canale per analisi strato poroso*

Il Cribellum non è stato modellato attraverso la geometria reale dei pori che, come discusso nel paragrafo precedente, sono nell'ordine dei 45 [nm], poiché la scala di grandezza non sarebbe gestibile insieme al resto del dominio in un unico modello; bensì, viene analizzata come un mezzo poroso omogeneizzato ed è stata trattata in Fluent tramite la condizione al contorno di porous zone. Questo approccio consente di rappresentare l'effetto macroscopico del Cribellum sul flusso (perdita di carico distribuita) senza risolvere esplicitamente la sua nanostruttura, i cui parametri geometrici (porosità, dimensione dei pori) vengono invece utilizzati come dati di ingresso per il modello di mezzo poroso, come discusso nel sottoparagrafo 4.2.3.

Per il processo di discretizzazione la geometria è stata importata all'interno di ANSYS Mechanical. La mesh complessiva conta 758.979 elementi (Fig. 81), con un infittimento localizzato nello strato poroso (Fig. 82) per catturare correttamente i gradienti di pressione più marcati in quella regione.

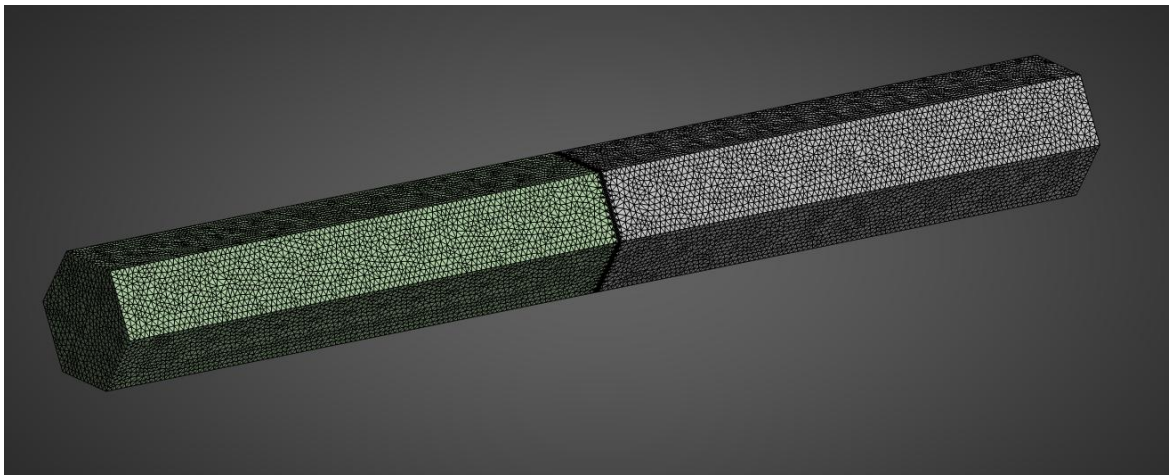


*Figura 81: Mesh*

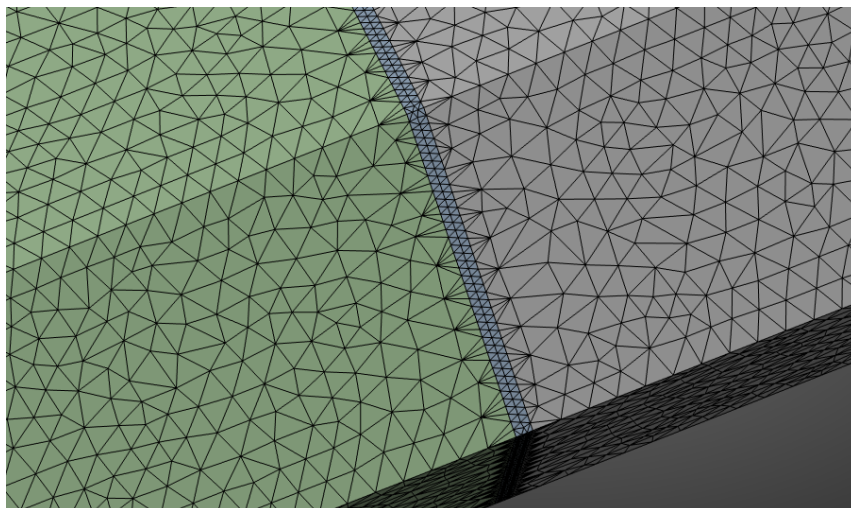


Figura 82: Dettaglio mesh strato poroso

## 4.2. Setup del problema e condizioni al contorno

Definita la strategia di modellazione del Cribellum come mezzo poroso omogeneizzato, è stato necessario completare il setup del problema con le condizioni al contorno standard del dominio di calcolo e con la scelta dei modelli fisici da adottare per la risoluzione del campo di moto (Fig. 83).

Su ANSYS Fluent si può eseguire lo studio di uno strato poroso in due modi: il primo impostando la condizione al contorno su una parete di interesse, in questo modo essa viene modellizzata come una superficie priva di spessore, per questo, questa tipologia di setup è valida solo se lo spessore dello strato poroso è nettamente inferiore alle grandezze caratteristiche in gioco. La seconda metodologia è impostare analizzare una zona volumetrica di interesse come strato permeabile, attivando l'impostazione *porous-zone*, nelle impostazioni della cell-zone del volume di interesse. In questo caso tutte le zone volumetriche andranno impostate come fluide, anche quella dello strato poroso; se si impostasse quest'ultimo come volume solido il solutore non andrebbe a convergenza.

A differenza del modello sviluppato nel capitolo 2, dove le pareti laterali del dominio esagonale erano trattate con condizione di periodicità traslazionale, scelta resa necessaria dalla presenza di una struttura ripetuta di areole adiacenti sull'intera superficie del frustolo, nel presente modello semplificato, le pareti del canale (*inlet\_wall*, *outlet wall*, *porous\_wall*) sono state definite come pareti solide reali, il materiale impostato è la biosilice, ma gli effetti di aderenza ne sono stati trascurati. Infatti, si è scelto di impostare la condizione di *free-slip*, in modo da creare un modello coerente con l'obiettivo dello studio: isolare il comportamento fluidodinamico del singolo condotto attraversato dal mezzo poroso, senza la necessità di replicare virtualmente l'interazione con celle adiacenti.

L'ingresso del dominio è stato definito come condizione di *velocity-inlet*, con velocità imposta normale alla sezione di ingresso e diretta lungo l'asse Z del canale, coincidente con la direzione di sviluppo del flusso e con la direzione principale di minor resistenza viscosa del mezzo poroso. Il valore della velocità in ingresso è stata una delle variabili di interesse

dello studio ed è stata fatta variare parametricamente in un intervallo compreso tra 0,001 e 0,2 m/s, così da costruire le curve di perdita di carico presentate nei paragrafi di post-processing. Tale intervallo di velocità, particolarmente contenuto, è stato scelto per restare coerente con l'ordine di grandezza dei flussi che attraversano realmente le strutture nanoporose del Cribellum, per quanto, ai fini computazionali, siano state trasposte in una scala geometrica macroscopica di maggiori dimensioni.

L'uscita del dominio è invece definita come pressure-outlet, con pressione relativa di riferimento imposta pari a 0 Pa, per simulare l'emissione in ambiente atmosferico, in analogia con l'approccio già adottato nel capitolo 2.

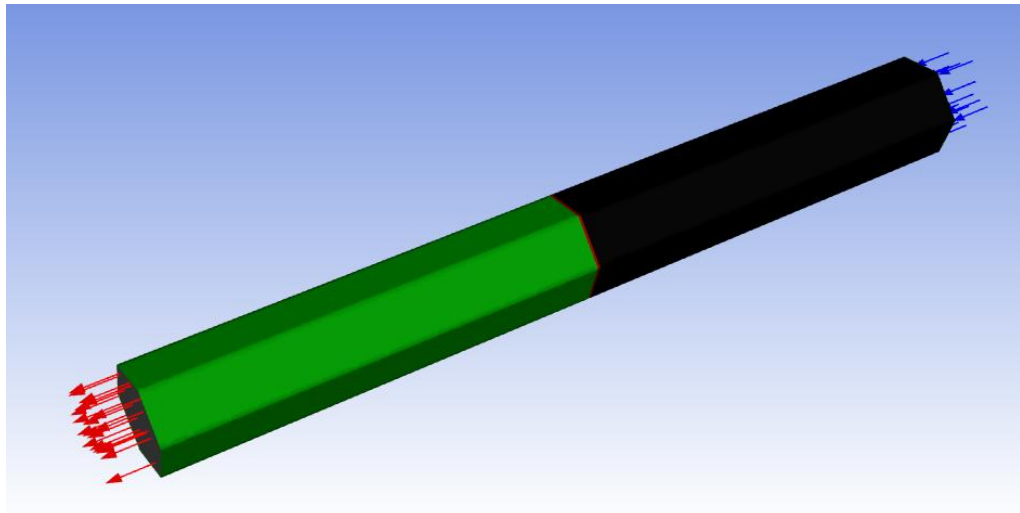


*Figura 83: Velocità in inlet e Pressione all'outlet*

Per quanto riguarda i modelli fisici, la temperatura di riferimento è stata impostata a 310,15 [K] (37 [°C]), corrispondente alla temperatura corporea fisiologica. Questa scelta, mantenuta anche per le simulazioni condotte con acqua come fluido di lavoro, non è casuale: anticipa la successiva estensione del modello al trasporto di sangue e alle applicazioni in ambito biomedicale discusse nel capitolo 2, permettendo di confrontare i risultati ottenuti con fluidi diversi a parità di condizioni termiche di riferimento. Poiché in questa fase dello studio non sono di interesse fenomeni di scambio termico né variazioni delle proprietà del fluido con la temperatura, l'equazione dell'energia è stata mantenuta disattivata, riducendo il problema alla sola risoluzione del campo di moto e di pressione.

Coerentemente con le basse velocità in gioco, e con i numeri di Reynolds che ne conseguono, analogamente a quanto già osservato nel capitolo 2 per i casi a bassa velocità di ingresso dove l'applicazione di un modello di turbolenza risultava non giustificata; per la totalità delle simulazioni condotte sul modello del Cribellum è stato adottato un modello laminare. Questa scelta risulta ulteriormente giustificata dalla natura stessa del problema: il flusso attraverso un mezzo poroso a resistenza viscosa dominante, per costruzione, avviene in regime di flusso strisciante (creeping flow), per il quale l'ipotesi di laminarità è pienamente appropriata e coerente con la stessa formulazione del modello di Darcy alla base della Problematica di setup 2.

#### 4.2.1. Problematica di setup 1 (lunghezza dei canali inlet ed outlet)

La prima criticità riscontrata nell'impostazione del modello ha riguardato la lunghezza dei canali di ingresso e uscita. Nella versione iniziale della geometria, realizzata con tratti inlet/outlet più corti, 15 [mm] ognuno (Fig. 84).

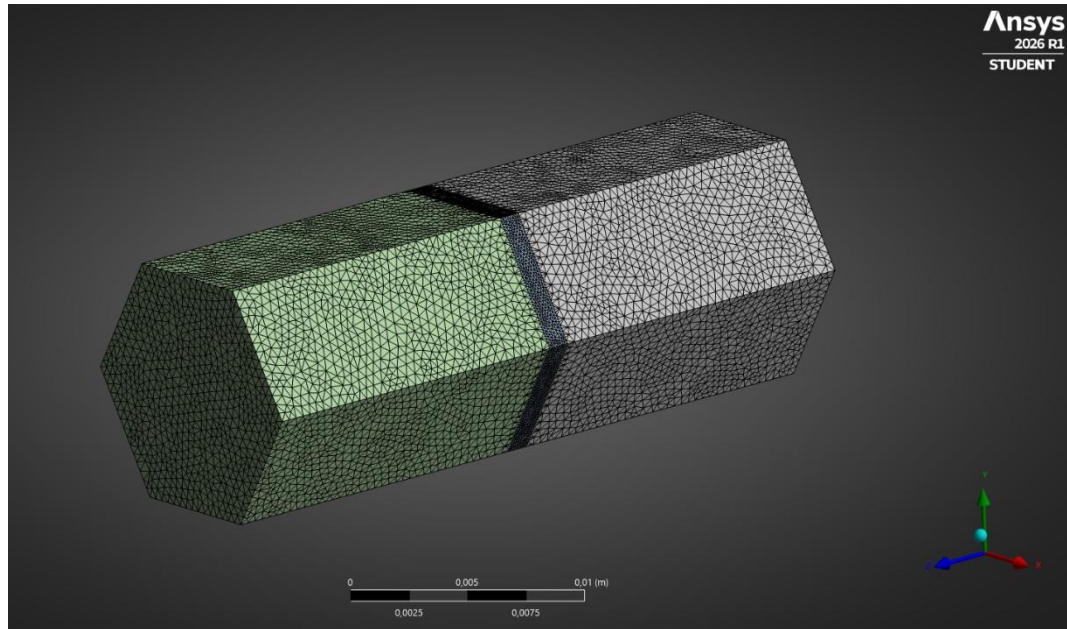


Figura 84: Geometria e mesh di primo tentativo

Seppure il calcolo giungesse a convergenza, i residui dell'equazione di continuità si mantenevano costantemente elevati, segno di un campo di moto non ancora sviluppato che risentiva eccessivamente della vicinanza delle condizioni al contorno allo strato poroso

Per risolvere il problema è stata quindi costruita la nuova geometria con canali di ingresso e uscita significativamente più lunghi sufficienti a garantire lo sviluppo del profilo di velocità prima e dopo l'attraversamento del Cribellum e a stabilizzare i residui su valori accettabili.

Va precisato che, cronologicamente, questa problematica è stata affrontata dopo le successive (relative alla scelta del modello di mezzo poroso e dei suoi parametri); viene tuttavia presentata per prima in questa trattazione per mantenere una coerenza espositiva con la struttura a blocchi del progetto in Workbench, in cui la geometria costituisce il primo step della catena di simulazione.

#### 4.2.2. Problematica di setup 2 (Darcy -Forchheimer)

Una volta stabilito che il Cribellum sarebbe stato trattato come mezzo poroso omogeneizzato tramite la condizione di porous zone, è stato necessario definire il modello matematico con cui Fluent introduce l'effetto del mezzo poroso nelle equazioni di conservazione della quantità di moto. Fluent modella la resistenza del mezzo poroso mediante l'aggiunta di un termine sorgente (sink) alle equazioni di Navier–Stokes standard, applicato all'interno della zona definita come porosa. Tale termine sorgente è composto da due contributi: uno di natura

viscosa (termine di Darcy) e uno di natura inerziale (termine di Forchheimer), secondo la relazione generale, definita lungo gli assi principali del mezzo poroso:

$$S_i = -\left(\sum_{j=1}^3 D_{ij} \mu v_j + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v| v_j\right)$$

Dove:

- $S_i$  è il termine sorgente per la componente i-esima della quantità di moto, che rappresenta la caduta di pressione attraverso lo strato poroso
- $\mu$  la viscosità dinamica del fluido,
- $\rho$  la densità,
- $v$  il vettore velocità,
- $D$  e  $C$  i tensori ( $3 \times 3$ ) delle resistenze rispettivamente viscosa e inerziale, generalmente definiti lungo gli assi principali del mezzo per tenerne in conto l'eventuale anisotropia [46].

Nel presente lavoro il mezzo poroso è stato trattato come anisotropo: la direzione principale di resistenza è stata allineata con l'asse Z, coincidente con la direzione di sviluppo del flusso lungo il canale, a cui è stato assegnato un valore di resistenza viscosa contenuto; alle direzioni trasversali X e Y è stata invece imposta una resistenza viscosa di tre ordini di grandezza superiore rispetto a quella principale. Questa scelta ha lo scopo di forzare numericamente il flusso a svilupparsi lungo la sola direzione Z, replicando così l'effetto fisico dei pori del Cribellum, che orientano il passaggio del fluido perpendicolarmente al piano della membrana, impedendone la dispersione laterale all'interno del mezzo omogeneizzato (Fig. 85).



Direction-1 Vector

X: 0

Y: 0

Z: 1

Direction-2 Vector

X: 1

Y: 0

Z: 0

Figura 85: Setup assi di riferimento strato poroso

Per quanto riguarda il contributo inerziale (termine di Forchheimer) (Fig. 86), lavorando a velocità molto basse, coerenti con l'ordine di grandezza tipico dei flussi attraverso strutture nanoporose come il Cribellum, se ne è trascurata l'influenza, imponendo un coefficiente di resistenza inerziale nullo su tutte le direzioni.

Figura 86: Setup coefficiente di Forchheimer

In queste condizioni l'equazione generale si riduce, per ciascuna direzione, alla sola componente viscosa (legge di Darcy):

$$S_i = -\frac{\mu}{\alpha_i} v_i$$

dove  $\alpha_i$  rappresenta la permeabilità del mezzo lungo la direzione i-esima ed interpretabile come l'inverso della resistenza viscosa ( $D_i$ ) (Fig. 87).

Figura 87: Setup coefficiente di Darcy

Questa semplificazione è giustificata dal fatto che, a basso numero di Reynolds, il termine inerziale rappresentato dal tensore  $C_{ij}$  e che cresce con il quadrato della velocità, risulta trascurabile rispetto al termine viscoso, dominante in regime di flusso strisciante (*creeping flow*).

La determinazione dei valori numerici del coefficiente di resistenza viscosa lungo Z, a partire dai parametri geometrici del Cribellum, è trattata separatamente ed è stata una seconda variabile in input di interesse, dopo la velocità all'inlet.

#### 4.2.3. Problematica di setup 3 (Porosità – Modello di Blake-Kozeny–Carman)

La scelta del modello di Darcy-Forchheimer per l'analisi dello strato poroso ha portato alla necessità di una valutazione a riguardo di quale tipologia di modello utilizzare. Infatti, un'altra metodologia di studio che entra in analisi, quando si studiano i modelli porosi, è data dalle equazioni di Blake-Kozeny e di Kozeny-Carman. Queste, che sono una l'implementazione dell'altra, tengono in considerazione la geometria del modello poroso assimilandolo ad una zona volumetrica ripiena di sfere (Fig. 88), il cui numero e dimensioni vanno ad incidere sulla permeabilità dello strato.



Figura 88: Simulazione dell'impacchettamento filtrante

Come anticipato, l'equazione di Kozeny–Carman descrive la permeabilità di un mezzo poroso in funzione della sua struttura geometrica (porosità e superficie specifica) ed è essenzialmente una formula per calcolare quanto è permeabile un materiale, partendo dalle sue caratteristiche fisiche come la dimensione dei pori e la tortuosità. È valida solo in regime di flusso laminare lento (basso numero di Reynolds). Dal punto di vista meccanico, la porosità non influenza direttamente il calcolo eseguito dal solutore, ma incide attraverso le eq.<sup>ni</sup> di Kozeny-Carman e Blake-Kozeny, le quali permettono di assimilare lo strato poroso ad un volume pieno di sfere, mettendo in relazione la caduta di pressione al diametro delle singole sfere ( $d_p$ ) e alla loro sfericità ( $\Phi_s$ )

L'equazione di Kozeny-Carmen è valida per valori di Reynolds bassi ( $Re < 1$ )

$$\frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{150\mu v (1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3 d_p^2 \Phi_s^2}$$

Dove:

- $\varepsilon$  = porosità ( $0 \leq \varepsilon \leq 1$ )
- $d_p$  = diametro della particella sferica equivalente
- $\Phi_s$  = sfericità della particella, con  $0 \leq \Phi_s \leq 1$  = perfettamente sferica

Mentre l'equazione di Blake-Kozeny viene utilizzata per valori di Reynolds leggermente superiori ( $1 < Re < 10$ ) e impone la perfetta sfericità delle particelle ( $\Phi_s = 1$ ), poiché per velocità maggiori diventa irrilevante:

$$\frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{150\mu v (1 - \varepsilon)^2}{\varepsilon^3 d_p^2}$$

Le equazioni di Kozeny-Carman (o Blake-Kozeny) è quindi complementare a quella di Darcy–Forchheimer, poiché da K-C (1) si può ricavare il parametro di permeabilità ( $k$ ) per poi inserirlo successivamente in D-F (2), che a sua volta descrive il flusso.

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{150\mu v (1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 d_p^2 \Phi_s^2} \\ (2) \frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{\mu}{k} v \end{array} \right. \rightarrow \frac{\mu}{k} v = \frac{150\mu v (1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3 d_p^2 \Phi_s^2} \rightarrow k = \frac{\varepsilon^3 d_p^2 \Phi_s^2}{150(1-\varepsilon)^2}$$

Riassumendo in modo schematico:

|                   | <b>Kozeny–Carman</b>       | <b>Darcy–Forchheimer</b> |
|-------------------|----------------------------|--------------------------|
| Scopo             | Calcolare la permeabilità  | Descrivere il flusso     |
| Input             | Geometria del mezzo poroso | Gradiente di pressione   |
| Regime            | Solo laminare lento        | Laminare e transizione   |
| Termine inerziale | No                         | Sì (termine quadratico)  |
| Scala             | Microstruttura             | Scala macroscopica       |

Un aspetto che è stato necessario chiarire nell'impostazione del modello riguarda il ruolo della porosità all'interno della formulazione del mezzo poroso in Fluent. Il termine sorgente caduta di pressione, introdotto dal precedentemente con il modello di Darcy-Forchheimer, dipende unicamente dalla velocità locale, dalla viscosità del fluido e dai coefficienti di resistenza viscosa e inerziale ( $\alpha$  e  $C_2$ ). Inoltre, le successive ipotesi di bassa velocità hanno ulteriormente semplificato l'equazione alla sola influenza del termine di Darcy.

$$S_i = -(\sum_{j=1}^3 D_{ij} \mu v_j + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v| v_j) \rightarrow S_i = -\frac{\mu}{\alpha_i} v_i$$

La porosità del mezzo, per come è definita in questa equazione, non compare esplicitamente come termine moltiplicativo della caduta di pressione; ma il suo effetto è già interamente incorporato nei coefficienti di resistenza, che vengono calibrati o calcolati a partire dalla geometria del mezzo, porosità inclusa. Di conseguenza, variare il solo parametro di porosità nel pannello *Porous Zone* di Fluent, lasciando invariati i coefficienti di resistenza viscosa e inerziale, non produce alcuna variazione della caduta di pressione calcolata. Questo comportamento è stato verificato numericamente: a parità di tutti gli altri parametri (spessore, coefficiente di Darcy, velocità in ingresso).

| spessore 0,3 [mm] - T 310,15 [K] - V_in 0,1 [m/s] - Res Viscosa {z} 2,11E+10 [m^-2] - Res Viscosa {x, y} 2,11E+13 [m^-2] |                   |            |         |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|------------|---------|
| porosity                                                                                                                 | d_p_static_porous | Dp_s/Dx    | Dp_s/Dx |
|                                                                                                                          | Pa                | Pa/m       | bar/m   |
| 1                                                                                                                        | 635,12            | 2117056,53 | 21,17   |
| 0,85                                                                                                                     | 635,12            | 2117056,53 | 21,17   |
| 0,7                                                                                                                      | 635,12            | 2117056,53 | 21,17   |
| 0,5                                                                                                                      | 635,12            | 2117056,53 | 21,17   |

Tabella 12: Risultati caduta di pressione per diverso setup di porosità

La variazione della porosità tra i valori 1, 0,85, 0,7 e 0,5 non ha prodotto alcuna variazione né della pressione statica né di quella totale calcolate (Fig. 89).

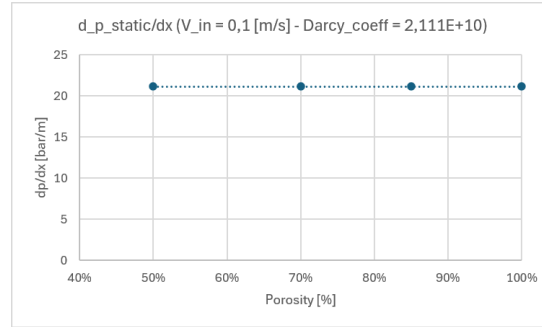


Figura 89: risultati in [bar/m]

La porosità, in Fluent, entra invece in gioco in altri termini del modello, ad esempio nel calcolo della diffusività effettiva per le equazioni di specie, energia o scalari trasportati, e nella formulazione della velocità fisica (*physical velocity*) quando quest'ultima è attivata. Ma non ha impatto diretto sulla caduta di pressione se non in presenza di fenomeni termodinamici rilevanti (scambio termico, trasporto di specie, comprimibilità) che nel presente studio non sono stati considerati, essendo l'analisi condotta in condizioni isoterme e con fluido incompressibile a proprietà costanti.

Per questo motivo, nella calibrazione dei coefficienti di resistenza del mezzo poroso, la porosità va considerata come parametro di input per la determinazione della permeabilità geometrica, e non come grandezza che agisce direttamente sul risultato della simulazione.

Al fine delle simulazioni il valore della porosità è stato impostato ad 1 ed è stato considerato come una costante ininfluente ai fini di questa tipologia di analisi.

#### 4.2.4. Problematica di setup 4 (Viscosità nel caso del sangue – Modello di Carreau-Yasuda)

Per estendere l'analisi del Cribellum al caso applicativo di maggiore interesse, la filtrazione del sangue in ambito biomedicale, è stato necessario introdurre un modello reologico non-newtoniano per la viscosità, poiché il sangue, a differenza dell'acqua, presenta un comportamento shear-thinning, ovvero la sua viscosità apparente cambia al variare del tasso di deformazione (shear rate).

Al fine di preparare un modello realistico e pronto per possibili studi futuri, si è scelto di modellizzare il comportamento del sangue attraverso il modello di Carreau-Yasuda. Questo modello mette in relazione la viscosità del fluido con il tasso di deformazione ( $\dot{\gamma}$ ) e la temperatura (T).

$$\mu = \eta(\dot{\gamma})H(T)$$

Dove  $H(T)$  è la legge di Arrheius che impone la temperatura:

$$H(T) = e^{\alpha\left(\frac{1}{T-T_0} - \frac{1}{T_\alpha-T_0}\right)}$$

Il modello di Carreau è basato su una legge di potenza e cerca di stabilire una curva di fitting per metter in relazione le funzioni di andamento per i fluidi Non-Newtoniani sia taglio-restringenti/pseudo-plastici ( $n < 1$ ), che taglio-dilatanti/fluidi dilatanti ( $n > 1$ ) [47] (Fig. 90).

$$\mu = H(T) \left\{ \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) [1 + (\lambda \dot{\gamma})^a]^{\frac{n-1}{a}} \right\}$$

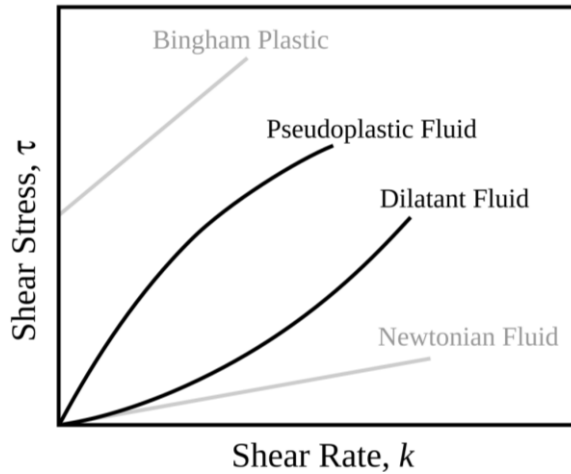


Figura 90: Andamenti viscosità dei diversi tipi di fluidi

Essendo uno studio iso-termo, però, il contributo termico viene trascurato, e viene implementata solamente la componente di sforzo di taglio (Fig. 91).

$$\mu = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) [1 + (\lambda \dot{\gamma})^a]^{\frac{n-1}{a}}$$

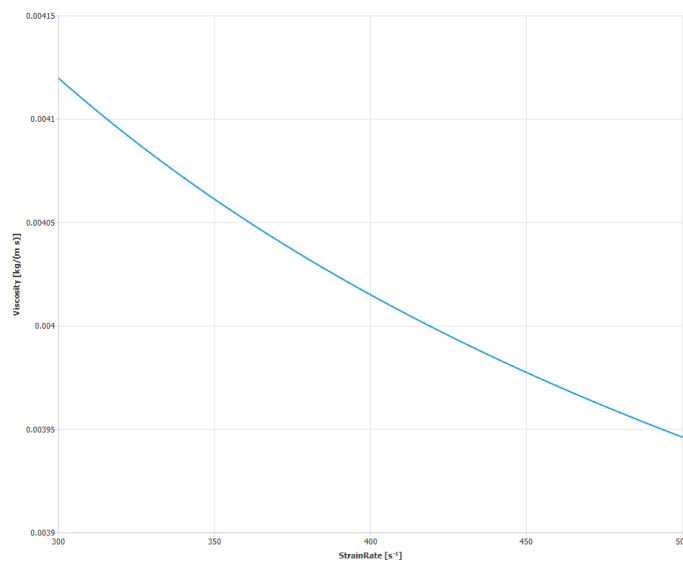


Figura 91: Andamento della viscosità in funzione dello strain rate

Il riferimento adottato per la scelta dei parametri reologici di base è duplice. Wu et al. (2017) [48], nello studio della fluidodinamica del sangue nelle arterie dell'avambraccio, modellano la viscosità del sangue tramite il modello di Carreau (in Fluent), fornendo i seguenti parametri (Fig. 92):

- viscosità a shear rate nullo  $\eta_0 = 0,056 \frac{kg}{m \cdot s}$ ,
- viscosità a shear rate infinito  $\eta_\infty = 0,0035 \frac{kg}{m \cdot s}$ ,
- tempo caratteristico  $\lambda = 3,313$  s,
- indice di potenza  $n = 0,3568$ ,
- densità del sangue di  $1060 \text{ kg/m}^3$ .

|                                     |        |
|-------------------------------------|--------|
| Time Constant, lambda [s]           | 3.313  |
| Power-Law Index, n                  | 0.3568 |
| Shape Parameter, a                  | 1.25   |
| Zero Shear Viscosity [kg/(m s)]     | 0.056  |
| Infinite Shear Viscosity [kg/(m s)] | 0.0035 |

Figura 92: Setup modello di Carreau-Yasuda

Gli stessi identici valori sono ripresi da Fragomeni (2023) [16], che li utilizza in un confronto sistematico tra modello newtoniano e modello di Carreau-Yasuda su vasi di grandi e piccole dimensioni (aorta e arterie coronariche), concludendo che le differenze tra i due approcci risultano trascurabili sulla velocità e sui flussi, e solo marginalmente rilevanti sullo sforzo di taglio a parete (Wall Shear Stress) nelle regioni a basso WSS. Inoltre, gli studi adottano inoltre un modello di flusso laminare per il sangue, coerentemente con la scelta già discussa precedentemente.

È importante notare che, in entrambi i lavori di riferimento, l'equazione utilizzata per descrivere la viscosità non è la formulazione generale di Carreau-Yasuda, bensì la sua particolarizzazione classica del modello di Carreau, in cui l'esponente di Yasuda ( $a$ ), anche chiamato parametro di forma, non viene specificato; per questo motivo è stata eseguita un'analisi al variare di tale parametro.

Nessuno dei due articoli esplora l'effetto di una variazione di questo parametro. Per colmare questa lacuna, nel presente lavoro si è scelto di adottare la formulazione generale del modello di Carreau-Yasuda, in cui l'esponente  $a$  compare esplicitamente come grado di libertà aggiuntivo, e ne è stata condotta un'analisi di sensitività, tramite uno script su MATLAB, per esplorare in modo sistematico l'effetto della variazione dell'esponente  $a$  sulla curva di viscosità, mantenendo fissi gli altri quattro parametri reologici ( $\eta_0$ ,  $\eta_\infty$ ,  $\lambda$ ,  $n$ ).

Nella figura sono state graficate tre curve calcolate rispettivamente per  $a = 0,5$ ,  $a = 2$  e  $a = 8$ : questo confronto rende immediatamente visibile come il parametro  $a$  controlli la

morbidezza della transizione tra le due zone della curva a differente pendenza, senza alterarne i valori asintotici (che restano fissati da  $\eta_0$  e  $\eta_\infty$ ), né la posizione della transizione lungo l'asse dello shear rate (governata da  $\lambda$ ). Valori di  $a$  più alti producono una transizione più brusca e ravvicinata attorno al tempo caratteristico  $1/\lambda$ , mentre valori più elevati la rendono più graduale e distribuita su un intervallo di shear rate più ampio (Fig. 93).

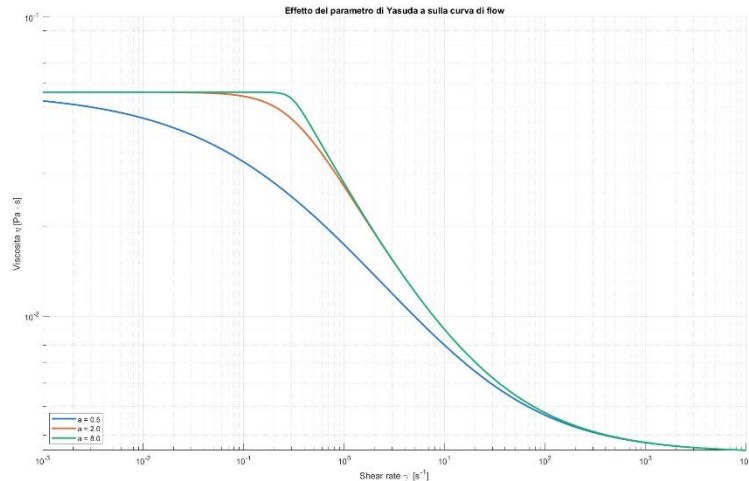


Figura 93: Effetto del parametro di Yasuda sull'andamento della curva di flusso viscosità-shear rate

Per poter validare la scelta del parametro di Yasuda, si è condotta l'analisi in Fluent per i casi  $a = 2, 1,75, 1,5, 1,25$  e  $1$ . I valori di caduta di pressione ottenuti al variare di  $a$  sono risultati pressoché coincidenti tra loro, con variazioni praticamente trascurabili (Fig. 94).

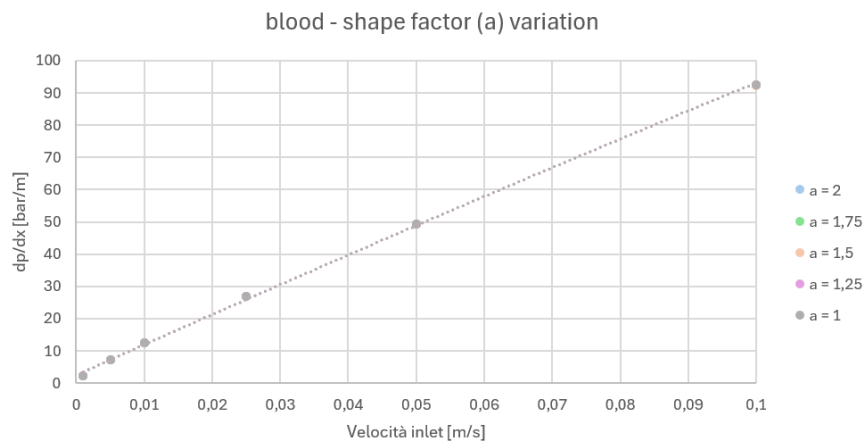


Figura 94: risultati in [bar/m]

In assenza quindi di un criterio discriminante di natura puramente numerica, la scelta del valore da adottare come riferimento è ricaduta su  $a = 1,25$ , in quanto unico valore, tra quelli testati, per cui esiste un preciso riscontro in letteratura. Tale valore è il parametro di transizione proposto da Cho e Kensey (1991) [49] nel loro studio sull'effetto della viscosità non-newtoniana del sangue sul flusso in vasi arteriosi patologici, ed è tuttora uno dei set di

parametri più citati in letteratura per la modellazione CFD del sangue tramite Carreau-Yasuda, come nel caso degli studi di Kang S. et al (2021) [50].

Di grande interesse sarebbe verificare quale sia effettivamente lo shape factor migliore per la caratterizzazione del sangue sulla base dell'influenza di uno sforzo di taglio variabile durante il processo di simulazione.

Inoltre, potrebbe essere considerata la possibilità di applicare il modello di Carreau-Yasuda anche ad altri tipi di fluidi, variando il parametro non solo in base al fluido ma anche al tipo di applicazione.

### 4.3. Confronto Risultati e Post-processing

#### 4.3.1. Fluido di lavoro: Acqua (H2O)

Il primo fluido analizzato è stata l'acqua, utilizzata come caso di riferimento per validare il comportamento del modello di mezzo poroso prima di estenderlo al caso del sangue. Sono state condotte tre distinte campagne parametriche, sintetizzate di seguito.

##### **Variazione della velocità in ingresso.**

Essendo questa analisi di caratterizzazione agli albori, è stato necessario impostare le prime basi di riferimento per le ricerche successive. La scelta del primo aspetto da analizzare è ricaduta sulla velocità di ingresso del fluido all'interno del canale, a parità di coefficiente di resistenza viscosa ( $\text{Darcy\_coeff} = 2,11 \times 10^{10} \text{ [m}^{-2}\text{]} \text{ lungo } Z$ ). La velocità in ingresso è stata fatta variare tra 0,001 e 0,2 [m/s] (Tab. 13).

Questo riscontro conferma che, pur avendo impostato la temperatura come parametro di riferimento a 310,15 [K], in questa fase, ha valore puramente identificativo/di coerenza con i casi successivi, ad esempio nel caso del sangue, senza impatto numerico sui risultati del caso H2O.

Dai risultati emerge la dipendenza lineare tra la caduta di pressione lineare e la variabile di input presa in considerazione, cioè la velocità di ingresso nel canale (Fig. 95).

| VARIAZIONE V_in (spessore 0,3 [mm] - T 310,15 [K] - Res Viscosa {z} 2,11E+10 [m <sup>-2</sup> ] - Res Viscosa {x, y} 2,11E+13 [m <sup>-2</sup> ], porosità 1 [-]) |                   |            |         |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|------------|---------|
| V_in                                                                                                                                                              | d_p_static_porous | Dp_s/Dx    | Dp_s/Dx |
| m s <sup>-1</sup>                                                                                                                                                 | Pa                | Pa/m       | bar/m   |
| 0,2                                                                                                                                                               | 1269,99           | 4233287,33 | 42,33   |
| 0,1                                                                                                                                                               | 635,12            | 2117056,53 | 21,17   |
| 0,05                                                                                                                                                              | 317,51            | 1058369,27 | 10,58   |
| 0,025                                                                                                                                                             | 158,74            | 529124,70  | 5,29    |
| 0,01                                                                                                                                                              | 63,49             | 211623,40  | 2,12    |
| 0,005                                                                                                                                                             | 31,75             | 105825,27  | 1,06    |
| 0,001                                                                                                                                                             | 6,35              | 21165,16   | 0,21    |

Tabella 13: Risultati caduta di pressione H2O al variare di v\_in

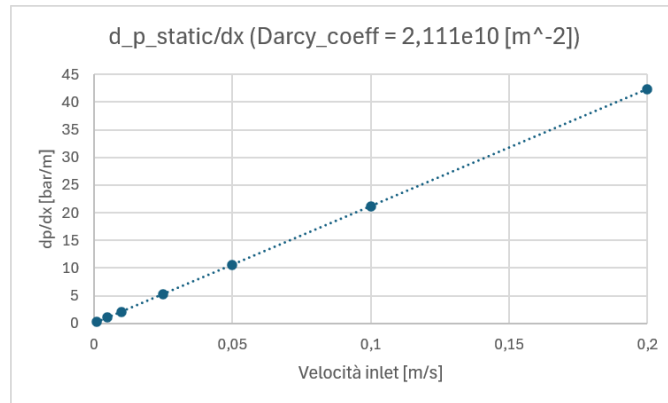


Figura 95: risultati in [bar/m]

### Variazione del coefficiente di Darcy.

La seconda variabile di interesse nell'equazione di Darcy è il coefficiente di resistenza viscosa che, a parità di velocità in ingresso ( $V_{in} = 0,1$  [m/s]), è stato fatto variare su sei ordini di grandezza, da  $2,11 \times 10^7$  a  $2,11 \times 10^{13}$  [m<sup>-2</sup>] (Tab. 14). Anche in questo caso i risultati sottolineano una relazione lineare tra la caduta di pressione ( $\Delta p$ ) e la variabile di interesse di questa casistica. I risultati vengono riportati in scala bi-logaritmica per una miglior validazione, poiché la caratterizzazione del coefficiente viscosa è stata eseguita su un range molto ampio al fine di coglierne l'effettiva influenza (Fig. 96).

| VARIAZIONE Darcy_coeff (thickness 0,3 [mm] - T 310,15 [K] - V_in 0,1 [m/s] - Res Viscosa {x, y} = Res Viscosa {z}*1E03, , porosità 1 [-]) |                   |               |          |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|---------------|----------|
| Darcy_coeff                                                                                                                               | d_p_static_porous | Dp_s/Dx       | Dp_s/Dx  |
| m <sup>-2</sup>                                                                                                                           | Pa                | Pa/m          | bar/m    |
| 2,11E+13                                                                                                                                  | 635141,04         | 2117136800,00 | 21171,37 |
| 2,11E+12                                                                                                                                  | 63513,71          | 211712363,30  | 2117,12  |
| 2,11E+11                                                                                                                                  | 6351,23           | 21170756,67   | 211,71   |
| 2,11E+10                                                                                                                                  | 635,12            | 2117056,53    | 21,17    |
| 2,11E+09                                                                                                                                  | 63,51             | 211704,26     | 2,12     |
| 2,11E+08                                                                                                                                  | 6,34              | 21143,80      | 0,21     |
| 2,11E+07                                                                                                                                  | 0,63              | 2117,07       | 0,021    |

Tabella 14: Risultati caduta di pressione H2O al variare del coefficiente di Darcy

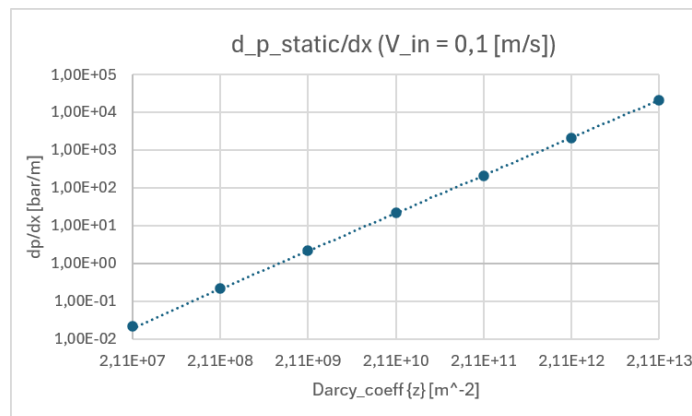


Figura 96: risultati in [bar/m]

#### 4.3.2. Fluido di lavoro: Sangue

Dopo aver analizzato l'influenza del parametro di forma di Yasuda (a), e la conseguente scelta di imporlo pari a 1,25, l'analisi di caratterizzazione del sangue è proseguita con la simulazione della caduta di pressione in funzione del coefficiente di resistenza viscosa.

Rispetto al caso dell'acqua, la caduta di pressione al metro raggiunge è di quasi 5 volte superiore rispetto a prima; ciò, sottolinea la forte influenza della viscosità (Tab. 15).

I risultati, presentati anche questa volta in scala bi-logaritmica, rispecchiano le previsioni di proporzionalità lineare, che viene persa solamente per valori bassi del coefficiente di Darcy, nell'ordine del  $10^7$ . Questo fenomeno è probabilmente dovuto all'avvicinamento verso valori tendenti allo zero. Nondimeno la possibile influenza del coefficiente di Yasuda, in termini di influenza sulla viscosità del sangue, potrebbe essere causa di discostamento dalla linearità e sarebbe necessario eseguire un'effettiva valutazione dell'influenza di questo coefficiente di forma sulla caduta di pressione, con uno sforzo di taglio variabile come parametro in input aggiuntivo (Fig. 97).

| VARIAZIONE Darcy_coeff (thickness 0,3 [mm] - T 310,15 [K] - V_in 0,1 [m/s] - Res Viscosa {x, y} = Res Viscosa {z}*1E03) |                   |               |          |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|---------------|----------|
| Darcy_coeff                                                                                                             | d_p_static porous | Dp_s/Dx       | Dp_s/Dx  |
| m <sup>-2</sup>                                                                                                         | Pa                | Pa/m          | bar/m    |
| 2,11E+13                                                                                                                | 2738591,30        | 9128637667,00 | 91286,38 |
| 2,11E+12                                                                                                                | 273852,49         | 912841633,30  | 9128,42  |
| 2,11E+11                                                                                                                | 27419,08          | 91396930,00   | 913,97   |
| 2,11E+10                                                                                                                | 2771,25           | 9237517,00    | 92,37    |
| 2,11E+09                                                                                                                | 295,51            | 985051,67     | 9,85     |
| 2,11E+08                                                                                                                | 29,94             | 99798,80      | 1,00     |
| 2,11E+07                                                                                                                | 7,65              | 25493,72      | 0,25     |

Tabella 15: Risultati caduta di pressione per il sangue al variare di  $v_{in}$

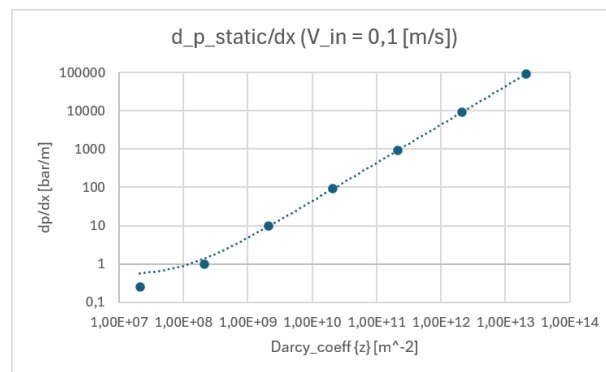


Figura 97: risultati in [bar/m]

#### 4.3.3. Fluido di lavoro: Aria

I risultati forniti dalla simulazione che utilizzano l'aria come fluido di lavoro sottolineano la facilità di attraversamento della membrana da parte di un gas rispetto ad un liquido (Tab. 16). Il valore massimo registrato, corrispondente alla velocità di ingresso massima analizzata, non supera 1 [bar]. Ciò porta alla possibilità di valutare la possibilità di applicazioni in cui il flusso non abbia necessità di essere forzato ad attraversare la membrana,

ma in cui sia sufficiente un piccolo contributo di spinta, come nel caso dei separatori liquido-gas a gravità (Fig. 98).

| VARIAZIONE $V_{in}$ (thickness 0,3 [mm] - T 310,15 [K] - Res Viscosa {z} 2,11E+10 [m <sup>-2</sup> ] - Res Viscosa {x, y} 2,11E+13 [m <sup>-2</sup> ]) |                         |            |            |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|------------|------------|
| $V_{in}$                                                                                                                                               | $d_{p\_static\_porous}$ | $Dp\_s/Dx$ | $Dp\_s/Dx$ |
| m s <sup>-1</sup>                                                                                                                                      | Pa                      | Pa/m       | bar/m      |
| 0,2                                                                                                                                                    | 22,66                   | 75532,86   | 0,75       |
| 0,1                                                                                                                                                    | 11,33                   | 37768,94   | 0,38       |
| 0,05                                                                                                                                                   | 5,66                    | 18878,13   | 0,19       |
| 0,025                                                                                                                                                  | 2,83                    | 9440,83    | 0,09       |
| 0,01                                                                                                                                                   | 1,13                    | 3775,31    | 0,04       |
| 0,005                                                                                                                                                  | 0,57                    | 1887,93    | 0,02       |
| 0,001                                                                                                                                                  | 0,11                    | 377,69     | 0,0038     |

Tabella 16: Risultati caduta di pressione per l'aria al variare di  $v_{in}$

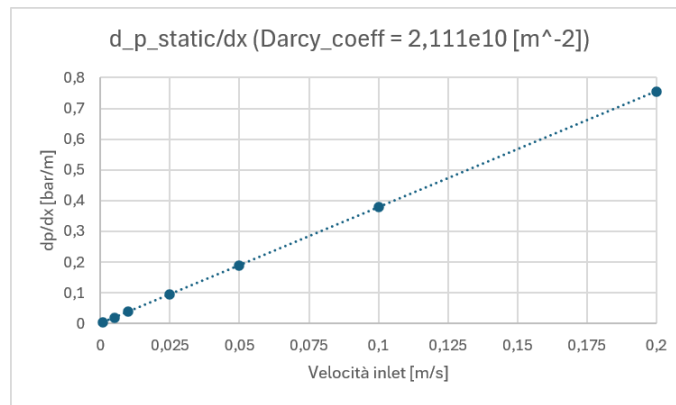


Figura 98: risultati in [bar/m]

#### 4.3.4. Confronto generale

Il confronto generale tra i risultati ottenuti permette di avere una visione più chiara dell'influenza del diverso tipo di fluido utilizzato. Particolarmente interessante è il distacco tra l'acqua e il sangue, poiché, nonostante siano due liquidi con una densità simile, la viscosità gioca un ruolo preponderante, portando il sangue a produrre una caduta di pressione in [bar] di quasi un ordine di grandezza maggiore rispetto a quella prodotta dall'acqua, a parità di velocità in ingresso del condotto. Di conseguenza le analisi future potrebbero concentrarsi sull'applicazione di una variazione dello shear stress, in modo da verificarne l'influenza sui diversi tipi di fluido di lavoro e l'interazione con il solido di permeazione.

Come osservato precedentemente, la permeazione dell'aria porta a cadute di pressione nettamente inferiori, di quasi due ordini di grandezza, a parità di velocità all'inlet (Fig. 99).

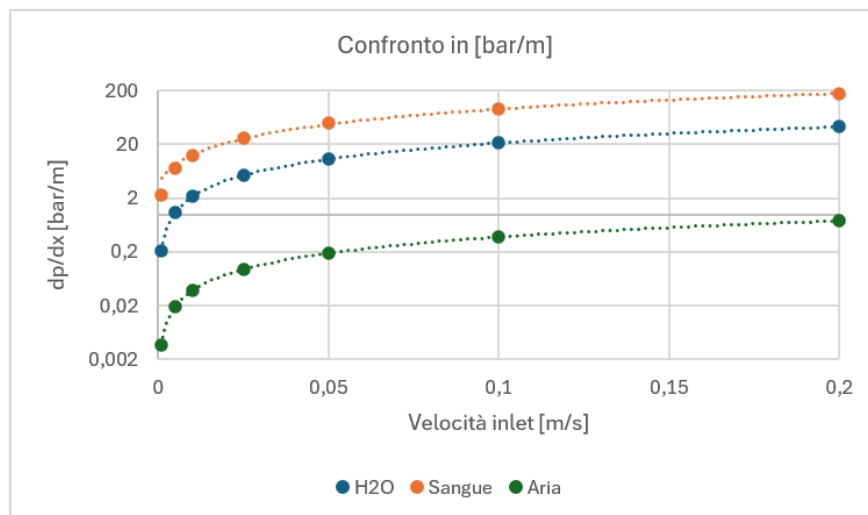


Figura 99: risultati in [bar/m]

## 5. Sviluppi Futuri

Il lavoro presentato in questa tesi ha affrontato lo studio fluidodinamico della parete porosa della diatomea in due momenti distinti. Nel capitolo 3 il Frustolo è stato analizzato con una geometria risolta, in due direzioni di flusso e con particelle in fase discreta. Nel capitolo 4 il Cribellum, impossibile da risolvere nella sua nanostruttura insieme al resto del dominio, è stato trattato come mezzo poroso omogeneizzato e caratterizzato con tre fluidi di lavoro. Il capitolo 2 ha poi mostrato in quali ambiti, dalla circolazione extracorporea al rilascio di farmaci, questa conoscenza potrebbe trovare applicazione. I due modelli restano però separati, e molti dei parametri del Cribellum sono stati imposti anziché misurati. Gli sviluppi descritti di seguito vanno in questa direzione: integrare i modelli, sostenerli con dati sperimentali e ampliarne il campo di validità.

### 5.1. Applicazione del Cribellum al modello in scala del Frustolo

Il primo passo per ampliare lo studio del modello ad un'analisi più fedele alla realtà della diatomea *Coscinodiscus* è riunire i due modelli, applicando lo strato poroso rappresentato dal Cribellum alla struttura del Frustolo. Lo spessore del Cribellum è stato impostato a 0,3 [mm] e il lato della sezione trasversale a 6 [mm] in modo da essere direttamente applicabili a valle del Frustolo, dopo il Cribellum e mantenere, di conseguenza, una coerenza dimensionale. Dopo aver inserito la porous zone del Cribellum esternamente al Cribum si potrà procedere con un'analisi di caratterizzazione simile a quella effettuata per i singoli componenti, al fine di confrontare la caduta di pressione e i campi di velocità con e senza lo strato esterno.

Già in una prima fase di sperimentazione, si è proceduto all'inserimento del Cribellum, rappresentato come strato poroso, per una raccolta dati.

I risultati da Foramen a Cribum a una  $v_{in} = 0,005$  [m/s] hanno evidenziato un forte aumento delle perdite di carico, passando da un valore di circa 3 [Pa] a quasi 94 [Pa]; inoltre si è aumentata la zona di ricircolazione all'interno del frustolo, con un conseguente aumento del tempo di residenza nello stesso.

Il medesimo comportamento è stato osservato anche nella direzione opposta, da Cribum a Foramen.

Dal confronto tra le geometrie benchmark e quelle variate, non si denota una elevata dipendenza dalle dimensioni del foramen, né dalla variazione di geometria del frustolo. Si deduce, quindi, che la maggior influenza dal punto di vista geometrico sia dovuta alla presenza dei raccordi, i quali vanno ad influenzare notevolmente la dinamica del flusso.

Di particolare interesse potrebbe essere andare a ripetere l'analisi DPM con la presenza del Cribellum. Il tempo di permanenza delle particelle all'interno del flusso sarà un possibile caso di studio, in particolar modo per quanto riguarda la somministrazione di medicinali nel caso del Drug Delivery, impostando un gradiente di pressione interna che permetta di simulare il rilascio graduale di sostanze.

Inoltre, l'omogeneizzazione non permette un'analisi precisa della permeazione di particelle. Servirà, quindi, un criterio esplicito di ritenzione, basato sul rapporto tra il diametro della particella e la dimensione caratteristica del poro. Al fine di questa ricerca, sarà necessario

integrare lo studio dello strato poroso tramite una modellazione basata sugli aspetti geometrici e dell'impacchettamento dello strato poroso. Naturale conseguenza sarà lo sviluppo del modello sulla base dell'equazione di Kozeny-Carman, per poter validare l'effettiva influenza della porosità sulla caduta di pressione attraverso la struttura.

Ulteriore sviluppo per rendere il modello ancor più realistico è innalzare le velocità di attraversamento dei fluidi e introdurre la componente inerziale nello studio, andando a prendere in considerazione anche gli effetti della seconda metà dell'equazione di Darcy-Forchheimer. Questo aumenterebbe il grado di fedeltà di rappresentazione della realtà da parte del modello, portando ad un notevole estensione del campo di studi e del campo delle applicazioni.

## **5.2. Influenza del parametro di Yasuda sul modello**

L'esponente di Yasuda nel modello di Carreau è stato fatto variare mantenendo fissi gli altri parametri reologici. Le cadute di pressione sono risultate pressoché coincidenti e la scelta di  $a=1,25$  è stata motivata soprattutto da riferimenti bibliografici. Un primo sviluppo consiste nel calcolare lo shear rate locale nei casi simulati e collocarlo sulla curva di Carreau-Yasuda, per verificare se l'intervallo di velocità usato cada davvero nella regione in cui  $a$  esercita un'influenza apprezzabile, oppure se la scarsa sensibilità osservata dipenda dal regime di shear rate esplorato. L'analisi può poi essere estesa agli altri parametri del modello, cioè  $\lambda$  e  $n$ , e confrontata con il caso newtoniano a viscosità costante. Un ulteriore affinamento riguarda la temperatura: nelle simulazioni con acqua la viscosità è rimasta quella costante di libreria nonostante la temperatura di riferimento di 310,15 K, perché l'equazione dell'energia era disattivata. Introdurre una viscosità dipendente dalla temperatura, secondo l'opzione prevista da Fluent, renderebbe il confronto tra i fluidi più aderente alle condizioni fisiologiche. A questo fine sarebbe di particolare interesse, non solo limitarsi a simulazioni di tipo RANS, ma ampliando lo studio a simulazioni di tipo LES, analizzando le variazioni delle caratteristiche fluidodinamiche del flusso in funzione di variabili in input tempo-varianti.

## **5.3. Campagna sperimentale di analisi e validazione**

Il limite più rilevante dell'analisi è derivante dal fatto che i coefficienti di resistenza viscosa sono stati imposti e non misurati; inoltre, il rapporto di anisotropia di tre ordini di grandezza tra la direzione principale  $\hat{z}$  e le direzioni trasversali è stata una scelta numerica presa al fine di forzare il flusso assiale. Una campagna sperimentale permetterebbe di superare questa ipotesi, in modo da validarne l'effettivo impiego o trovare un'alternativa realistica. Alcune sperimentazioni hanno già dimostrato la fattibilità di montare un singolo frustolo sull'estremità di un microcapillare e di misurare il trasporto diffusivo di fluoresceina e di nanoparticelle fluorescenti da 20 e 100 nm [42]. Una configurazione analoga, con misure di caduta di pressione al variare della portata, sarebbe di estremo interesse per fornire la permeabilità reale del Cribellum e del Frustolo. Il confronto con la stima di Blake-Kozeny indicherebbe se questa famiglia di modelli sia adatta a una membrana perforata, con cui si potrebbe simulare geometricamente il Cribellum, o se sia necessaria una calibrazione diversa.

In parallelo, un modello in scala stampato in 3D potrebbe essere strumentato con misure di campo, ad esempio PIV, per confrontare i campi di velocità con quelli simulati nel capitolo 3.

#### **5.4. Mappe caratteristiche della caduta di pressione in funzione sia di $V_{in}$ che del coefficiente di Darcy**

La campagna parametrica eseguita sul Cribellum come strato poroso ha mostrato che, per acqua, sangue e aria, la caduta di pressione cresce linearmente sia con la velocità in ingresso sia con il coefficiente di Darcy. Queste analisi sono state eseguite analizzando un singolo parametro in input per volta.

Alla luce della caratterizzazione ottenuta, si può estendere l'interesse di ricerca ad acquisire ulteriori dati per creare delle mappe di caratterizzazione in modo da validare i risultati di caduta di pressione al variare di più parametri alla volta.

## 6. Conclusioni

Questo elaborato ha affrontato lo studio fluidodinamico del frustolo della diatomea *Coscinodiscus* con l'obiettivo di capire come la sua architettura porosa a più strati governi il passaggio dei fluidi, e di valutare se tale comportamento possa ispirare soluzioni per la filtrazione e il trasporto in ambito biomedico, civile ed industriale.

Il lavoro si è sviluppato su 3 livelli, uno di ricerca bibliografica per la possibilità di applicazione, capitolo 2, e due livelli complementari di simulazione, raccolta ed analisi dati. Nel capitolo 3, la diatomea è stata risolta nella sua interezza attraverso simulazioni CFD volte alla determinazione della struttura di flusso generata, alle cadute di pressione e ai possibili effetti delle variazioni geometriche. Nel capitolo 4, il Cribellum è stato descritto come mezzo poroso omogeneizzato, poiché la modellazione tramite un approccio di natura geometrica, in questa fase dello studio, sarebbe risultata di troppo complessa realizzazione non è risolvibile insieme al resto del dominio.

Lo studio del frustolo ha evidenziato come il comportamento fluidodinamico dipenda in modo marcato dalla direzione di attraversamento. In particolare, il flusso da Cribum a Foramen genera cadute di pressione maggiori, risultando quindi più critico dal punto di vista della perdita di carico rispetto alla configurazione inversa. L'analisi ha inoltre mostrato che la scelta del modello di calcolo non è neutra: alle basse velocità, con numeri di Reynolds intermedi, il modello laminare descrive male la scia, mentre il modello di transizione  $k-\omega$  SST ( $\gamma-Re\theta$ ) è risultato il più adatto.

L'analisi DPM ha affiancato al campo di moto il trasporto di microparticelle in PET, evidenziando come al crescere del numero di particelle iniettate le curve di perdita di carico variano poco, e il tempo di attraversamento si mantiene molto breve, con un tempo medio pressoché indipendente dal numero di particelle. Cambia invece la distribuzione dei tempi massimi, perché una minoranza di particelle resta intrappolata nelle zone di ricircolo più a lungo. Nella direzione dal Cribum al Foramen la necessità di miscelare i sette flussi in ingresso produce una ricircolazione particellare più marcata.

Gli studi di tuning geometrico hanno poi mostrato come la forma incida sulle prestazioni. L'introduzione di un raggio di raccordo di 0,32 [mm], pari al 20% del diametro di un foro del Cribum, ha ridotto le perdite in entrambe le direzioni. A 0,05 [m/s], da Cribum a Foramen, la perdita totale è scesa da 91,63 a 72,98 [Pa]. Il confronto tra le geometrie ottenute con l'approccio data-driven (Best, Worst, AVG, Benchmark) ha mostrato che le variazioni di forma non aumentano in modo significativo la resistenza al flusso, ma accentuano l'asimmetria tra le due direzioni. Questo sposta l'attenzione dalla sola ottimizzazione strutturale alla progettazione multifunzionale: la geometria migliore dal punto di vista meccanico non coincide necessariamente con quella migliore dal punto di vista fluidodinamico, e la scelta dipende dalle condizioni d'uso.

Il capitolo 4, riguardante l'analisi del Cribellum ha caratterizzato lo strato poroso come mezzo omogeneizzato tramite la porous zone di Fluent. Il termine di Forchheimer è stato trascurato per le basse velocità, e la resistenza viscosa è stata imposta lungo l'asse del canale, con un rapporto di tre ordini di grandezza rispetto alle direzioni trasversali per forzare il flusso assiale. In queste condizioni, per acqua, sangue e aria, la caduta di pressione cresce

linearmente sia con la velocità in ingresso sia con il coefficiente di Darcy. Per l'acqua questo ha permesso una verifica di coerenza interna del modello. La viscosità ricavata dalla pendenza coincide con il valore di libreria del fluido, a conferma che il calcolo riproduce correttamente la legge di Darcy, mentre la porosità, nella formulazione del termine sorgente adottata, non ha influenzato la caduta di pressione.

La variazione dell'esponente di Yasuda per il sangue ha prodotto differenze trascurabili e il valore  $a = 1,25$  è stato scelto per il riferimento bibliografico disponibile. Il confronto tra i fluidi ha mostrato il ruolo dominante della viscosità. Il sangue produce cadute di pressione molto superiori a quelle dell'acqua, mentre l'aria attraversa lo strato con perdite di quasi due ordini di grandezza inferiori, restando sotto il bar anche alla velocità massima analizzata.

Un primo test di integrazione, con il Cribellum inserito nel modello del frustolo, ha confermato che il suo contributo non è trascurabile, a  $0,005 \text{ [m/s]}$  la perdita di carico è passata da circa  $3 \text{ [Pa]}$  a quasi  $94 \text{ [Pa]}$ , con un ampliamento della zona di ricircolo e un aumento del tempo di residenza all'interno del frustolo.

In relazione, agli ambiti applicativi esaminati, ovvero nei dispositivi extracorporei, nel rilascio di farmaci, nei filtri a carboni attivi e nei separatori per il reforming emerge una convergenza di fondo sull'uso di membrane o strati porosi multistrato a funzione graduata. Ne è emerso, però, anche il confine di quanto è stato dimostrato; il modello sviluppato descrive la sola resistenza idrodinamica di un mezzo poroso in regime convettivo, ma non descrive il trasporto di soluti, che governa la filtrazione dei dializzatori e il rilascio dei farmaci, né i meccanismi di soluzione-diffusione delle membrane al palladio dello steam reforming. I coefficienti di resistenza e il rapporto di anisotropia sono stati imposti e non derivati dalla geometria reale dei pori, e le scale di pressione calcolate vanno confrontate con quelle dei dispositivi reali prima di parlare di trasferibilità diretta, per questo si sottolinea l'importanza della validazione dei risultati tramite una campagna sperimentale.

In sintesi, il contributo principale di questo lavoro è una caratterizzazione fluidodinamica del frustolo a due livelli, con una geometria risolta e un modello omogeneizzato, che analizza l'influenza della direzione di flusso, della geometria e delle proprietà del fluido, determinandone il comportamento. Essa fornisce una base metodologica e una prima serie di mappe quantitative per le ricerche e gli sviluppi futuri: l'integrazione dei due modelli, la validazione sperimentale dei coefficienti e l'estensione al trasporto di massa; tutti passi necessari per rendere questo modello uno strumento di partenza concreto per la progettazione di sistemi di filtrazione bio-ispirati.

## Bibliografia

- [1] C. Avetta, "Fillotassi," Treccani, Enciclopedia Italiana Online, [Online]. Available: [https://www.treccani.it/enciclopedia/fillotassi\\_\(Enciclopedia-Italiana\)/](https://www.treccani.it/enciclopedia/fillotassi_(Enciclopedia-Italiana)/). [Accessed 30 Marzo 2026].
- [2] S. Watanabe, A. Tero, A. Takamatsua and T. Nakagaki, "Traffic optimization in railroad networks using an algorithm mimicking an amoeba-like organism, *Physarum plasmodium*," *BioSystems*, vol. 105, no. 3, pp. 225-232, 2011.
- [3] M. Ciulla, A. Massironi, M. Sugni, M. Ensign, S. Marzorati and M. Forouharshad, "Recent Advances in the Development of Biomimetic Materials," *Gels*, vol. 9, no. 10, p. 833, 2023.
- [4] c. Wikipedia, "Coscinodiscus," Wikipedia, The Free Encyclopedia, 28 Agosto 2025. [Online]. Available: <https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Coscinodiscus&oldid=1308252584>. [Accessed 27 Marzo 2026].
- [5] M. L. J. Eugene F. Stoermer, "15 - CENTRIC DIATOMS," in *Freshwater Algae of North America*, Burlington, JOHN D. WEHR, ROBERT G. SHEATH, 2003, p. 559.
- [6] L. Musenich, D. Origo, F. Gallina, M. J. Buehler and F. Libonati, "Revealing Diatom-Inspired Materials Multifunctionality," *Advanced Functional Materials*, vol. 35, no. 8, p. 2407148, 2025.
- [7] H. A. Zachary, S. Luob, S. N. Reynolds and C. a. G. J. R. Thaulowd, "Microstructure provides insights into evolutionary design and resilience of *Coscinodiscus* sp. frustule," *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, vol. 113, no. 8, pp. 2017-2022, 2016.
- [8] L. Musenich and F. Libonati, "Architected Structural Material Design Inspired by Diatoms: Merging Nature's Beauty With Engineering Through Biomimetics," 2026.
- [9] D. Sen and M. J. Buehler, "Structural hierarchies define toughness and defect-tolerance despite simple and mechanically inferior brittle building blocks," *Scientific Reports*, vol. 1, no. 1, p. 35, 2011.
- [10] A. P. Garcia, D. Sen and M. J. Buehler, "Hierarchical Silica Nanostructures Inspired by Diatom Algae Yield Superior Deformability, Toughness, and Strength," *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 42, no. 13, pp. 3889-3897, 2011.
- [11] B. Abdusatorov, A. I. Salimon, Y. D. Bedoshvili, Y. V. Likhoshway and A. M. Korsunsky, "FEM exploration of the potential of silica diatom frustules for vibrational MEMS applications," *Sensors and Actuators A: Physical*, vol. 315, p. 112270, 2020.
- [12] T. C. Hales, "The Honeycomb Conjecture," *Discrete & Computational Geometry*, vol. 25, no. 1, pp. 1-22, 2002.
- [13] Wikipedia, "ECMO," Wikipedia, l'enciclopedia libera., 11 Novembre 2025. [Online]. Available: <https://it.wikipedia.org/wiki/ECMO>. [Accessed 1 Agosto 2026].
- [14] A. Valentino, "Nurse24.it," 11 Aprile 2019. [Online]. Available: <https://www.nurse24.it/specializzazioni/emergenza-urgenza/ecmo-ossigenazione-extracorporea-membrana.html>. [Accessed 1 Agosto 2026].
- [15] N. Akbar and S. Nadeem, "Carreau fluid model for blood flow through a tapered artery with a stenosis," *Ain Shams Engineering Journal*, vol. 5, no. 4, pp. 1307-1316, 2014.

- [16] G. Fragomeni, "Newtonian and non-Newtonian blood model, a comparative study on large and small vessels," in *12th International Workshop on Innovative Simulation for Healthcare (IWISH), 20th International Multidisciplinary Modeling & Simulation Multiconference (I3M)*, Athens, Greece, 2023.
- [17] A. B. A. L. G. M. a. N. W. L. C. Ronco, "Effects of a reduced inner diameter of hollow fibers in hemodialyzers," *Kidney International*, vol. 58, no. 2, pp. 809-817, 2000.
- [18] T. Kiguchi, H. Ito and A. C. Yamashita, "Effect of membrane surface area on solute removal performance of dialyzers with fouling," *Membranes*, vol. 12, no. 7, 2022.
- [19] M. Fukuda, "Evolutions of extracorporeal membrane oxygenator (ECMO): perspectives for advanced hollow fiber membrane," *Journal of Artificial Organs*, 2023.
- [20] T. He, S. Yu, J. He, D. Chen, J. Li, H. H. Hu, X. Zhong, Y. Wang, Z. Wang and Z. Cui, "Membranes for extracorporeal membrane oxygenator (ECMO): History, preparation, modification and mass transfer," *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 49, pp. 46-75, 2022.
- [21] Ö. O. e. a. Teber, "Characterization and comparative evaluation of polysulfone and polypropylene hollow fiber membranes for blood oxygenators," *Journal of applied Polymer Science*, 2024.
- [22] H. E. Pacella, H. J. Eash and W. J. Federspiel, "Darcy permeability of hollow fiber bundles used in blood oxygenation devices," *Journal of Membrane Science*, vol. 382, no. 1-2, pp. 238-242, 2011.
- [23] S. P. Madhani, B. D. D'Aloiso, B. Frankowski and W. J. Federspiel, "Darcy permeability of hollow fiber membrane bundles made from Membrana® polymethylpentene (PMP) fibers used in respiratory assist devices,," *ASAIO Journal*, vol. 62, no. 3, pp. 329-331, 2016.
- [24] X. Liu, Y. Li, C. Wang, H. Wang, Y. Xi, A. Sun, X. Deng, Z. Chen and Y. Fan, "ECMO-associated hemolysis: Advances in mechanisms and clinical management," *Medicine in Novel Technology and Devices*, vol. 29, no. 100419, 2026.
- [25] J. Hagiwara, J. D. Della Volpe and Y. Matsuzaki, "What are the best biocompatible materials for extracorporeal membrane oxygenation," *Journal of Functional Biomaterial*, vol. 16, no. 6, p. 226, 2025.
- [26] S. Ye, D. T. Arazawa, Y. Zhu, V. Shankarraman, A. D. Malkin, J. D. Kimmel, L. J. Gamble, K. Ishihara, W. J. Federspiel and W. R. Wagner, "Hollow fiber membrane modification with functional zwitterionic macromolecules for improved thromboresistance in artificial lungs," *Langmuir*, vol. 31, no. 8, pp. 2463-2471, 2015.
- [27] M. R. Goodarzi and Mohebbi-Kalhor, "umerical modeling and parametric study of a hollow fiber dialyzer using double porous media approach," *South African Journal of Chemical Engineering*, vol. 42, pp. 1-11, 2022.
- [28] N. e. a. Cancilla, "Performance comparison of alternative hollow-fiber modules for hemodialysis by means of a CFD-based model," *Membranes*, vol. 12, no. 2, p. 118, 2022.
- [29] S. R. e. a. Tewfik, "Assessment of Characteristics and Performance of Fabricated Polysulfone and Polyethersulfone Hollow Fiber Membranes for Hemodialysis,," *Egyptian Journal of Chemistry*, vol. 68, no. 10, pp. 129-140, 2025.

- [30] T. Nguyen, K. Jang, N. Her, C. S. Kim, S. W. Kim, Kim and I. S., "Fabrication of hollow fiber membranes with different inner diameters for enhanced uremic toxins removal in hemodialysis: Exploring from high-flux to high molecular weight retention onset classes," *Journal of Membrane Science*, vol. 663, p. 121065, 2022.
- [31] Q. Zhang, X. Lu and L. Zhao, "Preparation of Polyvinylidene Fluoride (PVDF) Hollow Fiber Hemodialysis Membranes," *Membranes*, vol. 4, no. 1, pp. 81-95, 2014.
- [32] A. Saxena, A. Dutta, N. Kapoor, A. Kumar and A. Tiwari, "Envisaging marine diatom *Thalassiosira weissflogii* as a 'SMART' drug delivery system for insoluble drugs," *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, vol. 68, p. 102983, 2022.
- [33] H. e. a. Wang, "Construction of a high-capacity drug microcarrier using diatom frustules," *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, vol. 248, p. 114481, 2025.
- [34] W. Foundation, "Filtrazione sui carboni attivi," Wikipedia, l'enciclopedia libera., 13 Luglio 2026. [Online]. Available: [https://it.wikipedia.org/wiki/Filtrazione\\_sui\\_carboni\\_attivi](https://it.wikipedia.org/wiki/Filtrazione_sui_carboni_attivi). [Accessed 25 Settembre 2026].
- [35] L. Piai, J. Dykstra, A. VanderWal and A. Langenhoff, "Bioaugmentation of Biological Activated Carbon Filters for Enhanced Micropollutant Removal," *American Chemical Society EST Water*, vol. 2, pp. 2359-2366, 2022.
- [36] W. Wang, G. Olguin, D. Hotza, M. A. Seelro, W. Fu, Y. Gao and G. Ji, "Inorganic membranes for in-situ separation of hydrogen and enhancement of hydrogen production from thermochemical reactions," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 160, p. 112124, 2022.
- [37] B. Dittmar, A. Behrens, N. Schödel, M. Rüttinger, T. Franco, G. Straczewski and R. Dittmeyer, "Methane steam reforming operation and thermal stability of new porous metal supported tubular palladium composite membranes," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 21, pp. 8759-8771, 2013.
- [38] E. Palo, A. Salladini, B. Morico, V. Palma, A. Ricca and G. Iaquaniello, "Application of Pd-Based Membrane Reactors: An Industrial Perspective," *Membranes*, vol. 8, no. 4, p. 101, 2018.
- [39] E. -. E. I. G. A. AISBL, *Best Available Techniques for Hydrogen Production by Steam Methane Reforming*, 2021.
- [40] L. Musenich, L. Strozzi, M. Avalle and F. Libonati, "D-HAT: A Diatom-Inspired Structure for a Helmet Concept Against Trauma," *Advanced Intelligent Systems*, vol. 7, no. 4, p. 2400419, 2025.
- [41] L. Musenich, A. Stagni, L. Derin and F. Libonati, "Tunable energy absorption in 3D-printed data-driven diatom-inspired architected materials," *ACS Materials Letters*, vol. 6, pp. 2213-2222, 2024.
- [42] D. Losic, R. J. Pillar, T. Dilger, J. G. Mitchell and N. H. Voelcker, "Atomic force microscopy (AFM) characterisation of the porous silica nanostructure of two centric diatoms," *Journal of Porous Materials*, vol. 14, pp. 61-69, 2007.
- [43] P. Gnanamoorthy, V. Karthikeyan and V. A. Prabu, "Field emission scanning electron microscopy (FESEM) characterisation of the porous silica nanoparticulate structure of marine diatoms," *Journal of Porous Materials*, vol. 21, pp. 225-233, 2014.
- [44] D. Losic, G. Rosengarten, J. G. Mitchell and a. N. H. Voelcker, "Pore architecture of diatom frustules: Potential nanostructured membranes for molecular and particle

- separations,” *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, vol. 6, no. 4, pp. 1-8, 2006.
- [45] C. H. S. e. al., “Biological and biologically inspired functional nanostructures: Insights into structural, optical, thermal, and sensing applications,” *Advanced Materials*, vol. 37, no. e09281, pp. 1-56, 2025.
- [46] ANSYS, “8.2.3.2. Momentum Equations for Porous Media” in *Fluent User's Guide*,” ANSYS, Inc., 2025. [Online]. Available: [https://ansyshelp.ansys.com/Views/Secured/corp/v261/en/flu\\_ug/flu\\_ug\\_bcs\\_sec\\_cell\\_zones.html](https://ansyshelp.ansys.com/Views/Secured/corp/v261/en/flu_ug/flu_ug_bcs_sec_cell_zones.html). [Accessed 16 Marzo 2026].
- [47] ANSYS, “9.4.6.1. Temperature dependent viscosity” in *Ansyes Fluent User's Guide*,” ANSYS, Inc., 2025. [Online]. Available: [https://ansyshelp.ansys.com/account/secured?returnURL=%2FViews%2FSecured%2Fcorp%2Fv261%2Fen%2Fflu\\_ug%2Fflu\\_ug\\_sec\\_viscosity.html%23flu\\_ug\\_sec\\_viscosity\\_carreau](https://ansyshelp.ansys.com/account/secured?returnURL=%2FViews%2FSecured%2Fcorp%2Fv261%2Fen%2Fflu_ug%2Fflu_ug_sec_viscosity.html%23flu_ug_sec_viscosity_carreau). [Accessed giugno 2026].
- [48] Q. Wu, X. Liu, L. Pan, W. Tao and C. Qian, “Simulation analysis of blood flow in arteries of the human arm,” *Biomedical Engineering: Applications, Basis and Communications*, vol. 29, no. 4, p. 1750031, 2017.
- [49] Y. I. Cho and K. R. Kensey, “Effects of the non-Newtonian viscosity of blood on flows in a diseased arterial vessel. Part 1: Steady flows,” *Biorheology*, vol. 28, no. 3-4, pp. 241-262, 1991.
- [50] S. Kang, S. Nashar, E. R. Livingston and A. Masud, “Weakly imposed boundary conditions for shear-rate dependent non-Newtonian fluids: application to cardiovascular flows,” *Math Biosci Eng.*, vol. 18, no. 4, pp. 3855-3886, 2021.
- [51] R. Yokoi, M. Anraku, M. Takai, T. Isoyama, S. Hara, K. Sato and F. Watanabe, “Development of a Membrane Oxygenator for Long-Term ECMO Support Using Fine Silicone Hollow Fiber,” in *Evolving Therapies and Technologies in Extracorporeal Membrane Oxygenation*, IntechOpen, 2024.
- [52] N. Imtiaz, W. A. Stoddard, A. Ghazy and S. W. Day, “Oxygen transport in nanoporous SiN membrane compared to PDMS and polypropylene for microfluidic ECMO,” *Biomedical Microdevices*, vol. 27, no. 22, 2025.
- [53] E. Squicciarro, R. Rociola, R. G. Haumann, S. Grasso, R. Lorusso and D. Paparella, “Extracorporeal oxygenation and coronavirus disease 2019 epidemic: Is the membrane fail-safe to cross contamination?,” *ASAIO J.*, 2020.
- [54] M. e. a. Fukuda, “Electron microscopic confirmation of anisotropic pore characteristics for ECMO membranes theoretically validating the risk of SARS-CoV-2 permeation,” *Membranes*, vol. 11, no. 7, p. 529, 2021.
- [55] M. e. a. Fukuda, “Determining Accurate Pore Structures of Polypropylene Membrane for ECMO Using FE-SEM Under Optimized Conditions,” *Membranes*, vol. 15, no. 6, p. 174, 2025.
- [56] O. Bastien, C. Flamens, Z. Vichova and S. Paulus, “Extracorporeal membrane oxygenation (ECMO) pour les syndromes de détresse respiratoire aiguë (SDRA) sévères: Point de vue de l'anesthésiste réanimateur,” *IRBM*, vol. 31, pp. 31-34, 2010.
- [57] M. Voinova, N. Repin, E. Sokol, B. Tkachuk and L. Gorelik, “Physical Processes in Polymeric Filters Used for Dialysis,” *Polymers*, vol. 11, no. 3, p. 366, 2019.

- [58] A. D. Coulliette and M. J. Arduino, "Hemodialysis and Water Quality," *Semin. Dial.*, vol. 26, no. 4, pp. 427-438, 2013.
- [59] G. Catapano, G. Morrone, L. Hu, G. Fragomeni and A. Buscaroli, "Endotoxin-Retentive Filters for the Online Preparation of Ultrapure Dialysis Fluid and Non-Pyrogenic Substitution Fluid: A Critical Review and Reference Guide," *Membranes*, 2025.