

Riassunto della Tesi di Laurea Magistrale (Sessione 07/2021)

**"Studio del trasporto di materia in mezzi porosi in condizioni rarefatte"**

Candidato: Morena Vitale

Relatore: Roberto Pisano, Antonello Barresi, Gianluca Boccardo

L'acqua contenuta in una sostanza può causare alterazioni alla struttura, per questo motivo nel corso degli anni è stato necessario studiare tecniche sempre più raffinate per rimuovere l'umidità da un substrato, soprattutto nel caso se ne voglia inibire l'attività biologica residua, come nel caso dei prodotti farmaceutici. Un processo di notevole interesse è il processo di liofilizzazione che consiste nella sublimazione dell'acqua dal prodotto senza alterarne in modo significativo le proprietà (e.g.: efficacia del principio attivo).

Al giorno d'oggi sono liofilizzati farmaci, vaccini, sieri, cellule, prodotti termolabili o instabili, e prodotti alimentari.

In alcuni stadi del processo di sublimazione dell'acqua, i valori di pressione e temperatura saranno tali da non rendere più valida l'ipotesi di un flusso continuo all'interno dei pori, ma vi sarà un regime rarefatto (i.e. numero di Knudsen  $Kn > 0.1$ ).

Il trasporto di materia in mezzi porosi in regime rarefatto è da pochi anni oggetto di studi, a causa della sua complessità. È interessante studiare come le proprietà macroscopiche del fluido variano con il regime di flusso. In particolare, in questo elaborato di tesi viene approfondito il comportamento della tortuosità, della viscosità e della velocità alla scala macroscopica, tramite l'analisi dello stato dell'arte presente in letteratura ed alcuni test svolti tramite modelli numerici risolti al calcolatore.

Per condurre questo lavoro ci si può servire della fluidodinamica computazionale (CFD), che è in grado di risolvere equazioni altamente complesse in poco tempo. Numerosi metodi come quello di Monte Carlo, quello di Boltzmann e quello delle velocità discrete, risolvono l'equazione di Boltzmann che descrive bene i regimi di transizione; molti di questi sono stati implementati nella suite open-source di CFD ai volumi finiti OpenFOAM.

È stato simulato un micro-canale a porosità differenti, dimostrando che in condizioni rarefatte viene meno l'ipotesi di non slip alla parete, come è possibile vedere in Figura 1. Questo comporta una variazione della tortuosità idraulica, fortemente legata alla velocità. La mancanza di attrito rende più facile il passaggio del fluido, quindi la tortuosità diminuisce leggermente come è rappresentato in Figura 2. È stata studiata anche la viscosità, la quale diminuisce all'aumentare della rarefazione (Figura 3). Da questo risultato è stato possibile trovare una relazione di tipo Bosanquet tra la viscosità e il numero di Knudsen. L'espressione ottenuta è di notevole interesse per la simulazione di flussi rarefatti.

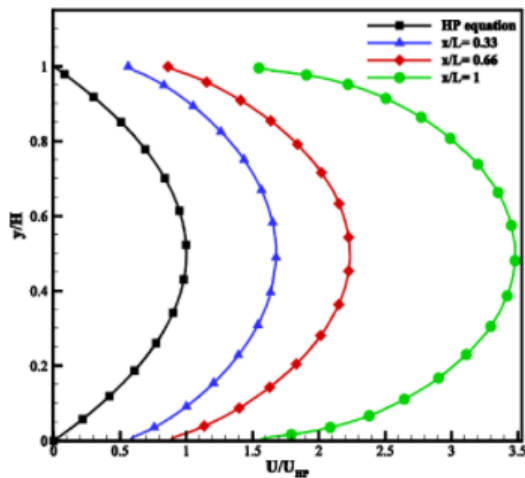


Figura 1: Andamento della velocità in condizioni continue (in nero) e in condizioni rarefatte lungo il canale. [3]

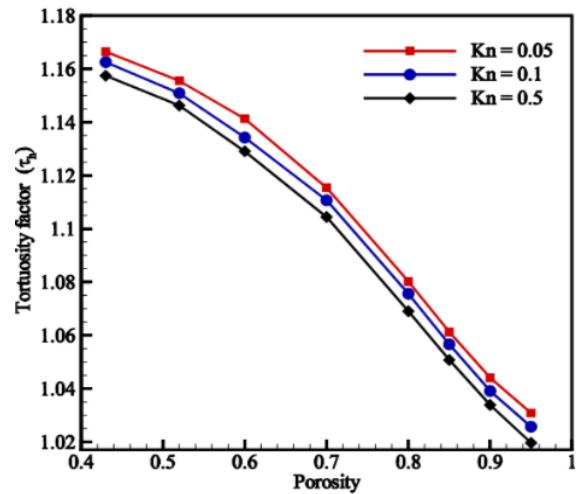


Figura 2: Andamento della tortuosità al variare del numero di Knudsen. [3]

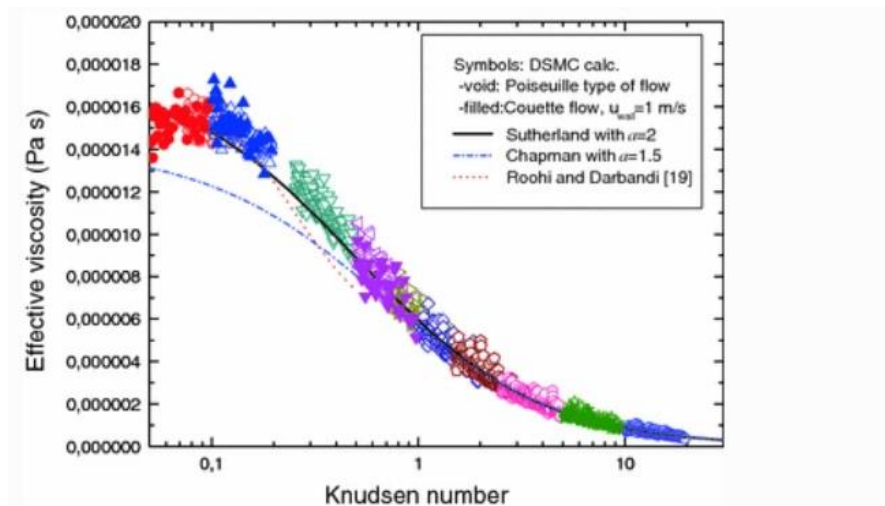


Figura 3: Andamento della viscosità al variare del numero di Knudsen.[1]

Da questi risultati si evince che la diffusione di Knudsen, solitamente trascurabile, è fondamentale a numeri elevati di Knudsen influenzando significativamente il flusso di materia.

#### Bibliografia

- [1] Michalis, V.K., Kalarakis, A.N., Skouras, E.D. and Burganos, V.N., 2010. Rarefaction effects on gas viscosity in the Knudsen transition regime. *Microfluidics and nanofluidics*, 9(4), pp.847-853.
- [2] White, C., Borg, M.K., Scanlon, T.J., Longshaw, S.M., John, B., Emerson, D.R. and Reese, J.M., 2018. dsmcFoam+: An OpenFOAM based direct simulation Monte Carlo solver. *Computer Physics Communications*, 224, pp.22-43.
- [3] Shariati, V., Ahmadian, M.H. and Roohi, E., 2019. Direct Simulation Monte Carlo investigation of fluid characteristics and gas transport in porous microchannels. *Scientific reports*, 9(1), pp.1-15.