



**Elettorali**

Divisione I – Ricerca Nazionale

Ripartizione III – Scuola di Dottorato

**Richiesta per borsa di studio da attivare ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021**

Il sottoscritto Giacomo Falcucci qualifica Professore Associato afferente al Dipartimento di Ingegneria dell'Impresa "Mario Lucertini" - Telefono 338 3707127 email giacomo.falcucci@uniroma2.it

**CHIEDE**

l'attivazione di una borsa di studio di dottorato ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021. A tal fine comunica quanto segue:

La borsa sarà attivata sul seguente corso di dottorato accreditato per il XXXVII ciclo: IPRI – Ingegneria per la Progettazione e Produzione Industriale

Area per la quale si presenta la richiesta (selezionare solo una delle due):

Innovazione

Green

Tipologia di cofinanziamento (pari ad euro 8000 una tantum):

Nome dell'Ente finanziatore pubblico o privato: Consorzio SCIRE

Persona di Riferimento: Prof. Gino Bella Telefono 329 9246621

Email gino.bella@gmail.com

Fondi di ricerca dipartimentali

Progetto di Ricerca (massimo 10.000 battute complessive spazi inclusi) che comprenda

**Descrizione del Progetto**

**Analisi Numerico-Sperimentale di Tecnologie di Accumulo di Energia Termica da Impiegare in Sistemi Energetici a Idrogeno**

L'Idrogeno rappresenta una valida alternativa ai combustibili fossili e contribuirà nei prossimi anni sia a *decarbonizzare* i processi industriali ed i vari settori economici [Corsini2009, Glenk2019, HY2020], sia a raggiungere gli ambiziosi obiettivi energetici per il clima contenuti nell'Energy Roadmap 2050 [EU2050] della Commissione Europea e nei 17 Obiettivi di Sviluppo Sostenibile delle Nazioni Unite, [UN-SDG].

**Elettorali**

Divisione I – Ricerca Nazionale

Ripartizione III – Scuola di Dottorato

L'immagazzinamento dell' $H_2$  pone una sfida fondamentale, a causa delle dimensioni e del peso molto ridotti della molecola di questo gas, [Züttel2003, Preuster2017, Abe2019]. Molte strategie sono state perseguite negli ultimi decenni, mediante l'uso di tecnologie ad alta pressione e criogeniche, o ammoniache e suoi composti correlati, [Borello12] o, ancora, tramite vettori organici, [Ott2011, Preuster2017]. Gli Idruri Metallici (MH), hanno dimostrato un notevole potenziale per lo stoccaggio di notevoli quantità di  $H_2$ , in particolare per applicazioni terrestri (stazionarie o nella trazione sia leggera che pesante), garantendo una sicurezza, compattezza e flessibilità maggiori rispetto a soluzioni chimiche, criogeniche e/o ad alta pressione, [Ashworth2020, Minu2018, Saki2007].

Tuttavia, la fattibilità tecnologica e la convenienza economica dei sistemi di stoccaggio dell'Idrogeno sono ancora lontane dall'essere raggiunte: nessuna delle attuali tecnologie, infatti, soddisfa tutti i criteri essenziali per una pratica "Economia dell'Idrogeno", [Abe2019]. Gli Idruri Metallici, purtroppo, non fanno eccezione, a causa della loro lenta cinetica chimica e della difficoltà nella gestione della loro temperatura. Durante l'assorbimento/rilascio di  $H_2$ , infatti, gli MH rilasciano/assorbono una quantità di calore approssimativamente pari al valore assoluto dell'entalpia di reazione, [Lototskyy2015]. Pertanto, un controllo e una gestione termica avanzati sono *fondamentali* per migliorare le prestazioni dei MH in termini di rilascio efficace di  $H_2$ , aumentando, così, l'efficienza complessiva dell'accumulo di energia. Questo controllo è al di fuori della portata degli attuali approcci analitici, numerici e sperimentali, [Nazir2019, Zhang2021].

Le attività di questo Dottorato saranno focalizzate sullo sviluppo degli strumenti metodologici e numerici multiscala per prevedere, controllare e ottimizzare il flusso di calore durante assorbimento/desorbimento di  $H_2$ , attraverso l'integrazione di sistemi a Idruri Metallici con un Tecnologie di Accumulo di Energia Termica (TES) basate su materiali a cambiamento di fase (PCM), [Argyrou2018, Cabeza2020]. I nuovi strumenti così sviluppati porteranno alla realizzazione di un innovativo sistema prototipale che integri e ottimizzi queste tecnologie.

Le attività sperimentali su PCM-TES sono ostacolate dalla difficoltà intrinseca nel monitorare un processo di scambio termico multiscala, con fenomeni di trasferimento locale attraverso più interfacce (pareti, PCM solido e liquido), [Zhang2021]. Da questo punto di vista, un approccio numerico fornisce il vantaggio chiave di isolare tutti gli effetti concomitanti, fornendo un'opportunità unica per gettare nuova luce sull'eterogeneità dinamica di un tale fenomeno multiscala, [Sarbu2019, He2019]. Come risultato finale di questo ambizioso progetto, sarà realizzato un dimostratore di scambiatore di calore innovativo (TRL 3/4), che segnerà il nuovo stato dell'arte per l'ottimizzazione delle prestazioni energetiche dell'accumulo a Idruri per i sistemi a  $H_2$ , con particolare attenzione

**Elettorali**

Divisione I – Ricerca Nazionale

Ripartizione III – Scuola di Dottorato

alle applicazioni automobilistiche. Verranno, infatti, considerati sistemi PCM-TES da integrare a bordo di veicoli leggeri e pesanti basati su celle a combustibile a membrana elettrolitica polimerica (PEM FC): le PEM FC sono le più prossime alla diffusione di massa tra i diversi tipi di celle a combustibile, e sono particolarmente adatte sia per impiego stazionario che per i trasporti, grazie alla loro elevata flessibilità in risposta alle variazioni di carico e alle loro temperature di esercizio relativamente basse, nell'intervallo 60°C–80°C. Il calore generato durante il funzionamento a tali temperature è difficilmente sfruttabile se non per la produzione (parziale) di acqua calda sanitaria, [Barbir2012]. Tale calore, invece, sarà convogliato a un dispositivo TES basato su materiali organici/paraffinici, [Cabeza2020], particolarmente adatti per operare nell'intervallo di temperatura dei PEM FC. Il TES svolgerà il ruolo di tampone termico e manterrà la temperatura dell'intero sistema Cella+Idruri nell'intervallo ottimale sia per il funzionamento della PEM FC che per il rilascio di H<sub>2</sub> dall'Idruro Metallico (da notare, la stessa tecnologia migliorerà anche le prestazioni di caricamento dell'Idruro, accumulando il calore in eccesso e mantenendo la temperatura nell'intervallo ottimale durante l'immagazzinamento dell'Idrogeno). La progettazione di una soluzione così innovativa richiede un'indagine numerica e sperimentale integrata e multiscala per colmare le attuali lacune metodologiche e tecnologiche che ostacolano la diffusione di sistemi energetici e di accumulo a base di H<sub>2</sub>.

Da un punto di vista teorico, il recupero di calore può essere classificato come un fenomeno di trasferimento di calore coniugato (CHT), [Zudin2017], sia per la presenza di materiali diversi sia per la natura transitoria nel tempo del processo di cambiamento di fase. I problemi CHT sono onnipresenti nelle principali applicazioni scientifiche e tecnologiche, oltre ad essere una sfida al centro della termo-fluidodinamica, [Zudin2017]. Con CHT definiamo processi di trasferimento di calore che coinvolgono sia la conduzione all'interno di un corpo solido, che la convezione dal solido al fluido circostante e viceversa. Pertanto, un'analisi CHT realistica richiede un accoppiamento completo tra i due fenomeni, che si ottiene imponendo due requisiti fisici: (i) la continuità della temperatura all'interfaccia tra i due materiali e (ii) la continuità nel flusso normale di calore, per garantire la conservazione dell'energia. Tuttavia, questo approccio pone una sfida da un punto di vista sia metodologico che computazionale: i metodi numerici convenzionali richiedono schemi di iterazione ed estrapolazione per ottenere le corrette condizioni coniugate, [Pareschi2016], rivelandosi particolarmente complessi e computazionalmente onerosi, soprattutto in presenza di geometrie complesse alle interfacce, [He2019]. Inoltre, il cambiamento di fase che si verifica all'interno del PCM aggiunge ulteriore complessità alla descrizione di un tale problema CHT, a causa dell'accurata ricostruzione dell'interfaccia e del trasferimento termico attraverso di essa.

**Elettorali**

Divisione I – Ricerca Nazionale

Ripartizione III – Scuola di Dottorato

Tramite questo Dottorato verrà sviluppata una piattaforma numerica completamente innovativa per l'analisi multiscala del trasferimento di energia termica nei PCM: tale nuova piattaforma consentirà la progettazione e la gestione ottimale delle nuove generazioni di Sistemi PCM-TES per l'accumulo e la fornitura di Idrogeno a Sistemi Energetici a Celle a Combustibile per autotrazione. L'innovativa piattaforma numerica verrà validata con attività sperimentali realizzate ad-hoc e permetterà la realizzazione di un prototipo della nuova tecnologia.

Da un punto di vista metodologico, il comportamento del PCM durante l'assorbimento e rilascio di calore verrà studiato con il metodo Lattice Boltzmann (LBM), noto per la sua flessibilità ed efficacia, grazie alla sua formulazione mesoscala [Facucci1 – Falcucci6]. LBM, infatti, si basa su una formulazione ottimizzata dell'equazione cinetica di Boltzmann e ha consentito il raggiungimento di notevoli traguardi scientifici e tecnologici negli ultimi anni, [Falcucci6, Thampi2016, Tiribocchi2021]. Rispetto all'approccio Navier-Stokes (NS), che si basa sull'assunzione del continuum, LBM fornisce dei vantaggi chiave, legati alle sue basi mesoscopiche, che consentono di incorporare più facilmente interazioni fisiche fondamentali, rispetto a NS, [Succi]. Inoltre, è computazionalmente efficiente, a causa della sua “non-linearità locale (collisioni molecolari) e non-località lineare (streaming molecolare)”, [Falcucci4, Succi].

Da un punto di vista temporale, l'attività del Dottorato seguirà il seguente cronoprogramma:

**I ANNO:**

- Studio dello Stato dell'Arte;
- Implementazione di Codici di base Lattice Boltzmann per lo studio di fenomeni di liquefazione/solidificazione nei PCM
- Implementazione di Algoritmi Entropici di base

**II ANNO:**

- Implementazione di Codici LBM Entropici avanzati, con parallelizzazione spinta sia su CPU che su GPU
- Validazione dei Codici con Esperimenti mirati, condotti in sede, presso il Dipartimento di Ingegneria dell'Impresa “Mario Lucertini”

**III ANNO:**

- Simulazioni di Sistemi in scala reale;
- Realizzazione di un prototipo basato sui risultati delle simulazioni su scala reale



**Elettorali**

Divisione I – Ricerca Nazionale

Ripartizione III – Scuola di Dottorato

- Attività sperimentale sul prototipo realizzato

**Obiettivi formativi:** Sviluppo di sofisticate ed innovative metodologie numeriche nel campo della progettazione termo-fluidodinamica dei Sistemi Energetici a Idrogeno; sviluppo di un prototipo di nuova tecnologia per Sistemi a Idrogeno

**Attività previste:** Attività Teoriche e Numeriche: sviluppo di nuovi algoritmi di calcolo per il dimensionamento e la previsione del funzionamento di sistemi di accumulo termico basati su PCM, per Sistemi a Idrogeno. Sviluppo Sperimentale di un Prototipo di nuova tecnologia

**Attinenza del progetto all'area indicata:** Il Progetto è centrato sulle Tematiche *Green*. I Sistemi Energetici a Idrogeno, infatti, costituiscono una delle alternative più interessanti e promettenti per la decarbonizzazione dei settori industriali e dei trasporti.

**Risultati attesi:** Sviluppo di nuovi metodi di calcolo e di una nuova tecnologia per l'ottimizzazione dei Sistemi Energetici a Idrogeno per autotrazione.

**Azienda pubblica o privata coinvolta nazionale o straniera in cui si prevede di far svolgere il periodo obbligatorio da 6 a 12 mesi previsto dal Decreto Ministeriale:**

OPV Solutions, <https://opvsolutions.eu>

**Firma**

**Elettorali**

Divisione I – Ricerca Nazionale

Ripartizione III – Scuola di Dottorato

**BIBLIOGRAFIA**

[Abe2019] Abe, J.O., Popoola, A.P.I., Ajenifuja, E. and Popoola, O.M., 2019. Hydrogen energy, economy and storage: review and recommendation. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(29), pp. 15072-15086.

[Argyrou2018] Argyrou, M.C., Christodoulides, P. and Kalogirou, S.A., 2018. Energy storage for electricity generation and related processes: Technologies appraisal and grid scale applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 94, pp.804-821.

[Ashworth 2020] Ashworth, C., 2020. Seeing Hydrogen. *Nature Reviews Materials*, 5(3), pp.172-172.

[Barbir2012] Barbir, F., 2012. *PEM fuel cells: theory and practice*. Academic press.

[Borello12] Borello, D., Del Prete, Z., Marchegiani, A., Rispoli, F., and Tortora, E., 2012. Analysis of an integrated PEMFC/ORC power system using ammonia for Hydrogen storage. In *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air*, vol. 44694, pp. 143-153. American Society of Mechanical Engineers.

[Cabeza2020] Cabeza, L. (Ed.), 2020. *Advances in Thermal Energy Storage Systems, 2<sup>nd</sup> edition*. Woodhead Publishing.

[Corsini2009] Corsini, A., Rispoli, F., Gamberale, M., and Tortora, E., 2009. Assessment of H<sub>2</sub>-and H<sub>2</sub>O-based renewable energy-buffering systems in minor islands. *Renewable Energy* 34, no. 1 (2009): 279-288.

[EU2050] European Commission, *A Clean Planet for all – A European strategic long-term vision for a prosperous, modern, competitive and climate neutral economy*, <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/PDF/?uri=CELEX:52018DC0773&from=EN>, 2018.

[Falcucci1] Montessori, A. and Falcucci, G., 2018. *Lattice Boltzmann modeling of complex flows for engineering applications*. Morgan & Claypool Publishers.

[Falcucci2] Chiappini, D., Sbragaglia, M., Xue, X. and Falcucci, G., 2019. Hydrodynamic behavior of the pseudopotential lattice Boltzmann method for interfacial flows. *Physical Review E*, 99(5), p.053305.

[Falcucci3] Succi, S., Amati, G., Bernaschi, M., Falcucci, G., Lauricella, M. and Montessori, A., 2019. Towards Exascale lattice Boltzmann computing. *Computers & Fluids*, 181, pp.107-115.

[Falcucci4] Falcucci, G., Amati, G., Fanelli, P., Krastev, V., Polverino, G., Porfiri, M., and Succi, S., 2021. Extreme flow simulations reveal skeletal adaptations of deep-sea sponges. *Nature* 595(7868), 537-541.

[Falcucci5] Facci, A.L., Lauricella, M., Succi, S., Villani, V., and Falcucci, G., 2021. Optimized Modeling and Design of a PCM-enhanced H<sub>2</sub> Storage, *Energies*, 14, 1554. <https://doi.org/10.3390/en14061554>.

[Falcucci6] Krastev, V.K., Falcucci, G., Jannelli, E., Minutillo, M. and Cozzolino, R., 2014. 3D CFD modeling and experimental characterization of HT PEM fuel cells at different anode gas compositions. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(36), pp.21663-21672.

[Glenk2019] Glenk, G. and Reichelstein, S., 2019. Economics of converting renewable power to hydrogen. *Nature Energy*, 4(3), pp.216-222.

**Elettorali**

Divisione I – Ricerca Nazionale

Ripartizione III – Scuola di Dottorato

[He2019] He, Y.L., Liu, Q., Li, Q. and Tao, W.Q., Lattice Boltzmann methods for single-phase and solid-liquid phase-change heat transfer in porous media: A review. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 129, 160-197, 2019.

[HY2020] European Commission, *A hydrogen strategy for a climate-neutral Europe*, <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?qid=1599052948314&uri=CELEX:52020DC0301> , 2020.

[Lototsky2015] Lototsky, M., Sekhar, B.S., Muthukumar, P., Linkov, V. and Pollet, B.G., 2015. Niche applications of metal hydrides and related thermal management issues. *Journal of Alloys and Compounds*, 645, pp.S117-S122.

[Minu2018] Minutillo, M., Forcina, A., Jannelli, N. and Lavadera, A.L., 2018. Assessment of a sustainable energy chain designed for promoting the hydrogen mobility by means of fuel-cell powered bicycles. *Energy*, 153, pp.200-210.

[Nazir2019] Nazir, H., Batool, M., Osorio, F.J.B., Isaza-Ruiz, M., Xu, X., Vignarooban, K., Phelan, P. and Kannan, A.M., 2019. Recent developments in phase change materials for energy storage applications: A review. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 129, pp.491-523.

[Ott2011] Ott, S., 2011. Ironing out hydrogen storage. *Science*, 333(6050), pp.1714-1715.

[Pareschi2016] Pareschi, G., Frapolli, N., Chikatamarla, S.S. and Karlin, I.V., 2016. Conjugate heat transfer with the entropic lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, 94(1), p.013305.

[Preuster2017] Preuster, P., Alekseev, A. and Wasserscheid, P., 2017. Hydrogen storage technologies for future energy systems. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, 8, pp.445-471.

[Saki2007] Sakintuna, B., Lamari-Darkrim, F. and Hirscher, M., 2007. Metal hydride materials for solid Hydrogen storage: a review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(9), pp.1121-1140.

[Sarbu2019] Sarbu, I. and Dorca, A., 2019. Review on heat transfer analysis in thermal energy storage using latent heat storage systems and phase change materials. *International Journal of Energy Research*, 43(1), pp. 29-64.

[Succi] Succi, S., 2001. *The lattice Boltzmann equation: for fluid dynamics and beyond*. Oxford university press.

[Thampi2016] Thampi, S.P., Doostmohammadi, A., Shendruk, T.N., Golestanian, R. and Yeomans, J.M., 2016. Active micromachines: Microfluidics powered by mesoscale turbulence. *Science advances*, 2(7), p.e1501854.

[Tiribocchi2021] Tiribocchi, A., Montessori, A., Lauricella, M., Bonaccorso, F., Succi, S., Aime, S., Milani, M. and Weitz, D.A., 2021. The vortex-driven dynamics of droplets within droplets. *Nature Communications*, 12(1), pp.1-10.

[UN-SDG] <https://sdgs.un.org/goals>

[Zhang2021] Zhang, S., Feng, D., Shi, L., Wang, L., Jin, Y., Tian, L., Li, Z., Wang, G., Zhao, L. and Yan, Y., 2021. A review of phase change heat transfer in shape-stabilized phase change materials (ss-PCMs) based on porous supports for thermal energy storage. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 135, p.110127.



**TOR VERGATA**  
UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA

**Direzione II – Ricerca, Terza Missione, Procedure**

**Elettorali**

Divisione I – Ricerca Nazionale

Ripartizione III – Scuola di Dottorato

[Zudin2017] Zudin, Y.B., 2017. *Theory of Periodic Conjugate Heat Transfer*. Springer.

[Züttel2003] Züttel, A., 2003. Materials for hydrogen storage. *Materials Today*, 6(9), pp.24-33.