



Ricerca di Sistema elettrico

# Validazione del modello e studio modellistico per la previsione delle prestazioni di processi e sistemi energetici basati sulle tecnologie P2G/L (gas/liquids)

V. Tola, G. Cau, D. Cocco, L.Lecis, F. Lonis, M. Petrollese



VALIDAZIONE DEL MODELLO E STUDIO MODELLISTICO PER LA PREVISIONE DELLE PRESTAZIONI DI PROCESSI E SISTEMI ENERGETICI BASATI SULLE TECNOLOGIE P2G/L(GAS/LIQUIDS)

V. Tola, G. Cau, D. Cocco, L. Lecis, F. Lonis, M. Petrollese  
(Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Chimica e dei Materiali, Università degli Studi di Cagliari)

Dicembre 2021

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Piano Triennale di Realizzazione 2019-2021 - II annualità

Obiettivo: *Sistema Elettrico*

Progetto: 1.2 Sistemi di accumulo, compresi elettrochimico e power to gas, e relative interfacce con le reti

Work package: 3 Power-to-gas

Linea di attività: LA22 "Power to Gas/Liquid: studi modellistici delle tecnologie e Design of experiments – Validazione"

Responsabile del Progetto: Giulia Monteleone, ENEA

Responsabile del Work package: Eugenio Giacomazzi, ENEA

Il presente documento descrive le attività di ricerca svolte all'interno dell'Accordo di collaborazione tra ENEA e Università degli Studi di Cagliari dal titolo "Power to Gas/Liquid: studi modellistici delle tecnologie e Design of experiments"

Responsabile scientifico ENEA: Ing. Paolo Deiana

Responsabile scientifico: Prof. Ing. Vittorio Tola

## Indice

SOMMARIO.....	5
1 INTRODUZIONE.....	6
2 LE TECNOLOGIE POWER-TO-X.....	8
3 DESCRIZIONE DEI PROCESSI.....	14
3.1 PRODUZIONE DI IDROGENO ED ELETTROLISI DELL'ACQUA.....	15
3.1.1 <i>Elettrolisi alcalina</i> .....	16
3.1.2 <i>Elettrolisi PEM</i> .....	17
3.1.3 <i>Elettrolisi SOE</i> .....	18
3.1.4 <i>Sintesi delle caratteristiche degli elettrolizzatori</i> .....	19
3.2 PROCESSI DI SINTESI DEI COMBUSTIBILI.....	20
3.2.1 <i>Sintesi del metanolo: introduzione</i> .....	20
3.2.2 <i>Sintesi del dimetiletere: introduzione</i> .....	22
3.2.3 <i>Sintesi del metano: introduzione</i> .....	23
3.3 PROCESSI DI PRODUZIONE DELL'ENERGIA ELETTRICA.....	25
3.3.1 <i>Celle a combustibile ad ossidi solidi (SOFC)</i> .....	25
3.3.2 <i>Turbina a gas a recupero chimico (CRGT)</i> .....	27
3.3.3 <i>Impianti a ciclo Rankine Organico (ORC)</i> .....	28
3.4 PROCESSI DI RIMOZIONE DELLA CO <sub>2</sub> .....	29
3.5 PROCESSI DI ACCUMULO TERMICO.....	30
4 DESCRIZIONE DEI MODELLI DI SIMULAZIONE.....	32
4.1 ELETTROLISI DELL'ACQUA.....	32
4.1.1 <i>Modello dell'elettrolisi alcalina</i> .....	32
4.1.2 <i>Modello dell'elettrolisi PEM</i> .....	33
4.1.3 <i>Modello dell'elettrolisi SOE</i> .....	34
4.2 PROCESSI DI SINTESI DEI COMBUSTIBILI.....	36
4.2.1 <i>Sintesi del metanolo: schema di funzionamento in ambiente Aspen-Plus</i> .....	36
4.2.2 <i>Sintesi del metanolo: modello di simulazione del reattore catalitico</i> .....	38
4.2.3 <i>Sintesi del dimetiletere: modello di simulazione in Aspen-Plus</i> .....	40
4.2.4 <i>Sintesi del metano: modello di simulazione in Matlab</i> .....	41
4.3 SISTEMI DI PRODUZIONE DI ENERGIA ELETTRICA.....	42
4.3.1 <i>Modello della cella a combustibile SOFC</i> .....	42
4.3.2 <i>Modello della turbina a gas a recupero chimico (CRGT)</i> .....	43
4.3.3 <i>Modello dell'impianto ORC</i> .....	44
4.4 SISTEMI DI RIMOZIONE DELLA CO <sub>2</sub> .....	45
4.5 SISTEMI DI ACCUMULO TERMICO TES.....	45
5 PRESENTAZIONE DEI CASI STUDIO.....	48
5.1 CASO STUDIO 1: ELETTROLIZZATORE ALCALINO AEL + CELLA A COMBUSTIBILE SOFC.....	48
5.1.1 <i>Sezione di elettrolisi</i> .....	49
5.1.2 <i>Sezione di sintesi del metanolo</i> .....	49
5.1.3 <i>Cella a combustibile SOFC</i> .....	50
5.1.4 <i>Impianto ORC</i> .....	50
5.2 CASO STUDIO 2: CELLA REVERSIBILE AD OSSIDI SOLIDI RSOC.....	50
5.2.1 <i>Elettrolizzatore SOE</i> .....	51
5.2.2 <i>Sezione di sintesi del metanolo</i> .....	51
5.2.3 <i>Cella a combustibile SOFC</i> .....	52
5.2.4 <i>Sezione di accumulo termico</i> .....	52
5.3 CASO STUDIO 3: ELETTROLIZZATORE ALCALINO AEL + TURBINA A GAS A RECUPERO CHIMICO CRGT.....	53
5.3.1 <i>Sezione di elettrolisi</i> .....	54
5.3.2 <i>Impianto CRGT</i> .....	54

5.3.3	Sezione di rimozione della CO <sub>2</sub> .....	54
5.3.4	Impianto ORC.....	55
6	RISULTATI.....	56
6.1	DEFINIZIONE DEGLI INDICI DI PRESTAZIONE .....	56
6.2	RISULTATI DEL CASO STUDIO 1: AEL + SOFC.....	60
6.2.1	Risultati della sezione di elettrolisi.....	60
6.2.2	Risultati della sezione di sintesi del metanolo.....	60
6.2.3	Risultati della cella a combustibile SOFC.....	62
6.2.4	Risultati dell'impianto ORC.....	63
6.3	RISULTATI DEL CASO STUDIO 2: RSOC.....	64
6.3.1	Risultati della sezione di elettrolisi.....	64
6.3.2	Risultati della sezione di sintesi del metanolo.....	66
6.3.3	Risultati della SOFC.....	66
6.3.4	Risultati della sezione di accumulo termico TES .....	66
6.4	CONFRONTO DELLE PRESTAZIONI DEI CASI STUDIO 1 E 2 .....	67
6.5	RISULTATI DEL CASO STUDIO 3: AEL + CRGT .....	68
6.5.1	Risultati della sezione di elettrolisi.....	68
6.5.2	Risultati della sezione di sintesi del metanolo.....	69
6.5.3	Risultati dell'impianto CRGT .....	69
6.5.4	Risultati della sezione di rimozione, compressione e stoccaggio della CO <sub>2</sub> .....	72
6.5.5	Risultati impianto ORC.....	73
6.5.6	Risultati dell'impianto CRGT integrato con l'impianto ORC.....	74
7	ANALISI LCA DI UN SISTEMA POWER-TO-POWER.....	79
7.1	ANALISI DELLE FASI DELLA LCA.....	79
7.2	RISULTATI DELL'ANALISI LCA .....	82
7.3	CONSIDERAZIONI CONCLUSIVE SULL'ANALISI LCA.....	88
8	CONCLUSIONI .....	89
9	RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI .....	91
10	ABBREVIAZIONI ED ACRONIMI.....	96
	CURRICULUM SCIENTIFICO DEL GRUPPO DI RICERCA .....	97

## Sommario

L'attività di ricerca svolta durante la LA-23 si inquadra nell'ambito degli studi volti all'avanzamento delle conoscenze nel settore dei processi innovativi di riutilizzo dell'anidride carbonica e di accumulo dell'energia da fonti rinnovabili attraverso tecnologie P2G/L (gas/liquids). Durante la LA-23 sono stati applicati i modelli di simulazione per l'analisi delle prestazioni energetiche delle tecnologie P2G/L, sviluppati e validati nella precedente linea di attività LA-22, ai processi di sintesi del metanolo mediante idrogenazione catalitica della CO<sub>2</sub>, con idrogeno prodotto dal surplus di produzione elettrica da fonte rinnovabile, integrati con differenti sistemi energetici per la produzione di energia elettrica con ridotte emissioni di CO<sub>2</sub>. In particolare, i sistemi integrati studiati sono basati su: i) un processo elettrolitico per la produzione dell'idrogeno a bassa temperatura (a elettrolita alcalino) o innovativo ad alta temperatura (ad ossidi solidi, SOE), ii) un sistema di sintesi del metanolo, iii) un sistema di produzione dell'energia elettrica alimentato con il metanolo (cella a combustibile ad ossidi solidi SOFC, impianto ORC, turbina a gas a recupero chimico CRGT), iv) un sistema di accumulo termico TES, v) un sistema di rimozione della CO<sub>2</sub>.

In questo contesto sono stati sviluppati e validati diversi modelli numerici attraverso il software Aspen-Plus per la simulazione e l'analisi delle prestazioni dei sistemi di produzione dell'energia elettrica (con particolare riferimento alle celle a combustibile SOFC, agli impianti ORC e alle turbine a gas a recupero chimico di piccola taglia) e della loro integrazione con il sistema nel suo complesso, e dei modelli numerici per la valutazione delle prestazioni dei sistemi di accumulo termico e dei sistemi di rimozione della CO<sub>2</sub>.

Infine, è stata applicata ai processi power-to-X l'analisi del ciclo di vita (LCA, Life Cycle Analysis), ovvero un metodo di valutazione dell'impatto ambientale di un prodotto lungo l'intero ciclo di vita, dall'estrazione delle materie prime allo smaltimento. Questa analisi ha permesso di determinare l'impatto sulla salute umana, sull'ecosistema, sui cambiamenti climatici e sul consumo di risorse delle due configurazioni di impianto per la produzione e l'utilizzo del metanolo studiate in questa linea di attività.



# Analisi funzionale all'applicazione delle metodologie del Design of experiments al prototipo P2G/L(gas/liquids) di Sotacarbo

V. Tola, G. Cau, F. Lonis



## ANALISI FUNZIONALE ALL'APPLICAZIONE DELLE METODOLOGIE DEL DESIGN OF EXPERIMENTS AL PROTOTIPO P2G/L (GAS/LIQUIDS) DI SOTACARBO

V. Tola, G. Cau, F. Lonis  
(Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Chimica e dei Materiali, Università degli Studi di Cagliari)

Dicembre 2021

### Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA  
Piano Triennale di Realizzazione 2019-2021 - II annualità  
Progetto: Tema 1.2 – Sistemi di accumulo, compresi power to gas, e relative interfacce con le reti  
Work package: “Power to Gas” (P2G)  
Linea di attività: LA23 “Power to Gas/Liquid: studi modellistici delle tecnologie e Design of experiments – validazione”  
Responsabile del Progetto: Giulia Monteleone, ENEA  
Responsabile del Work package: Eugenio Giacomazzi, ENEA

Il presente documento descrive le attività di ricerca svolte all'interno dell'Accordo di collaborazione tra ENEA e Università degli Studi di Cagliari dal titolo “Power to Gas/Liquid: studi modellistici delle tecnologie e Design of experiments”  
Responsabile scientifico ENEA: Ing. Paolo Deiana  
Responsabile scientifico Prof. Ing. Vittorio Tola

## Indice

SOMMARIO.....	4
1 INTRODUZIONE.....	5
2 I PROCESSI POWER-TO-X .....	7
3 DESCRIZIONE DELLE ATTIVITÀ SVOLTE.....	11
3.1 PROCESSO DI SINTESI DEL METANOLO E MODELLO ASPEN-PLUS .....	12
3.2 CASI STUDIO.....	13
4 RISULTATI.....	15
4.1.1 <i>Risultati al variare della pressione operativa e del grado di ricircolo in funzione della temperatura.....</i>	15
4.1.2 <i>Risultati al variare del rapporto molare <math>n_{H_2/CO_2}</math> in ingresso alla sezione e della pressione operativa in funzione della temperatura .....</i>	26
5 CONCLUSIONI .....	34
6 RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI .....	35
7 ABBREVIAZIONI E ACRONIMI .....	37
CURRICULUM SCIENTIFICO DEL GRUPPO DI RICERCA .....	38

## Sommario

L'attività di ricerca svolta durante la LA-23 si inquadra nell'ambito degli studi per l'accrescimento delle conoscenze nel settore dei processi innovativi di accumulo dell'energia da fonti rinnovabili (FER) e di riutilizzo dell'anidride carbonica attraverso le tecnologie P2G/L (gas/liquids). Nella LA-23 sono stati utilizzati i modelli di simulazione per l'analisi delle prestazioni delle tecnologie P2G/L, sviluppati e validati nella precedente linea di attività LA-22. I suddetti modelli sono stati applicati ai processi di sintesi del metanolo mediante idrogenazione catalitica della CO<sub>2</sub>, con idrogeno prodotto dal surplus di produzione elettrica da FER, integrati con differenti sistemi energetici per la produzione di energia elettrica con ridotte emissioni di CO<sub>2</sub>.

A valle dello sviluppo e dell'applicazione dei modelli, è stata effettuata un'analisi funzionale alla valutazione delle potenzialità di applicazione della metodologia della pianificazione statistica degli esperimenti (Design of Experiments, DoE) alla sperimentazione del prototipo P2G/L recentemente installato presso il centro ricerche Sotacarbo. Attraverso i modelli in parola si è proceduto ad una analisi per individuare le principali relazioni fra le prestazioni del processo di sintesi del metanolo (portata richiesta di idrogeno e CO<sub>2</sub> in ingresso, conversione della CO<sub>2</sub>, selettività del metanolo, resa di metanolo e di CO, ecc.), e i parametri operativi ad essi legati (pressione, temperatura dei reagenti in ingresso, rapporto molare dei reagenti, ecc.), con la conseguente individuazione dei fattori di progetto e di esercizio più significativi.