

POLITECNICO DI TORINO

Collegio di Ingegneria Chimica e dei Materiali

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Chimica e
dei Processi Sostenibili



**Politecnico
di Torino**

Tesi di Laurea Magistrale

**Analisi tramite CFD di sistemi di storage
termico latente a letto impaccato**

Relatori

Prof. Daniele MARCHISIO

Prof. Gianluca BOCCARDO

Dott. Diego FIDA

Candidata

Giorgia VELLUCCI

Marzo 2026

Indice

Elenco delle tabelle	III
Elenco delle figure	IV
Acronimi	VII
Lista dei simboli	IX
1 Packed bed Latent Heat Thermal Energy Storage (PBLHTES)	3
1.1 Classificazione dei sistemi di stoccaggio di energia termica	3
1.2 Fondamenti fisici dell'accumulo a calore latente	5
1.3 Phase Change Material (PCM)	6
1.3.1 Classificazione PCM	7
1.3.2 Incapsulamento	10
1.4 Architettura dei sistemi di stoccaggio di calore latente a letto impaccato	11
2 Stato dell'arte	15
2.1 Modelli a singola fase	15
2.2 Modelli a due fasi	16
2.2.1 Modello di Schumann	16
2.2.2 Modello del Solido Continuo	17
2.2.3 Modello di Dispersione Concentrica	17
2.3 Limiti dei modelli macroscopici e ruolo della fluidodinamica compu- tazionale	18
3 Metodi numerici	19
3.1 foamCase	19
3.2 Metodo dei volumi finiti	21
3.3 Schemi di discretizzazione	22
3.3.1 Discretizzazione spaziale	22
3.3.2 Discretizzazione temporale	24

3.4	Solver	25
3.4.1	porousSimpleFoam	25
3.4.2	PCMFoam	26
4	Set-up delle simulazioni	28
4.1	Campagna di simulazioni	28
4.2	Geometrie	30
4.3	REV	33
4.3.1	Sfere monodisperse	34
4.3.2	Sfere bimodali	35
4.3.3	Ellissoidi monodispersi	35
4.4	Mesh	36
4.4.1	blockMesh	36
4.4.2	snappyHexMesh	36
4.4.3	topoSet	38
4.4.4	transformPoints	39
4.4.5	checkMesh	39
4.5	Campo di moto	40
4.6	Impostazione per la risoluzione dei fenomeni termici	43
5	Risultati e considerazioni	46
5.1	Panoramica dei parametri e delle grandezze estratte	46
5.2	Considerazioni sui materiali	50
5.3	Considerazioni sulla geometria	56
5.4	Considerazioni sulla temperatura HTF	61
5.5	Sintesi delle varie configurazioni	64
	Appendice	68
	Bibliografia	71

Elenco delle tabelle

1.1	Proprietà desiderate di un PCM	7
4.1	Proprietà termofisiche dei PCM simulati [23]	29
4.2	Set di simulazioni numeriche adottato per lo studio del processo di carica termica	30
4.3	Dimensioni dei REV delle diverse configurazioni	35
4.4	Proprietà termofisiche dell'HTF	41
4.5	Pressione in ingresso e velocità per le diverse tipologie di impaccamento.	41
5.1	Velocità normalizzate	65
5.2	Risultati delle simulazioni	65

Elenco delle figure

1.1	Tipologie di sistemi di stoccaggio di energia termica	4
1.2	Capacità di accumulo di un sistema di accumulo termico a calore latente	6
1.3	classificazione dei PCM sulla base della natura chimica	8
1.4	LTES Shell&Tube [15]; LTES Packed Bed [10]	11
1.5	Componenti di un PBLTHES [16]	12
4.1	Letto impaccato di sfere monodisperse	31
4.2	Letto impaccato di ellissoidi	32
4.3	Letto impaccato con distribuzione bimodale	33
4.4	Studio del volume elementare rappresentativo: l'errore relativo sulla porosità media è riportato per 100 rappresentazioni di ciascun impaccamento, ognuna composta da un certo numero di granuli [24].	34
4.5	Generazione della mesh con snappyHexMesh [25]	37
4.6	Mesh del REV di un impaccamento di sfere monodisperse	38
4.7	Campo di moto in sfere monodisperse di diametro 1 cm	42
4.8	Campo di moto in sfere monodisperse di diametro 2 cm	42
4.9	Campo di moto per ellissoidi	42
4.10	Campo di moto per sfere bimodali	42
4.11	Condizione su T inlet	43
5.1	Esempio di grafico dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ (Simulazione1)	47
5.2	Esempio di contour plot della temperatura in corrispondenza di varie fasi del processo di carica (Simulazione1)	48
5.3	Grafici delle temperature medie in funzione del tempo adimensionale τ (Simulazione1). Le barre verticali indicano la varianza.	49
5.4	Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra i due materiali (Simulazione 1 e 2)	51
5.5	Contour plot di temperatura nel caso della paraffina 60 (Simulazione 1)	52

5.6	Contour plot di temperatura nel caso della paraffina 50 (Simulazione 2)	52
5.7	Confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 1 e 2).	52
5.8	confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 1 e 2).	52
5.9	confronto tra le varianze della temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 1 e 2).	53
5.10	confronto tra le varianze della temperatura nel PCM in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 1 e 2).	53
5.11	Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra i due materiali (Simulazioni 4 e 8)	53
5.12	Contour plot di temperatura nel caso della paraffina 60 (Simulazione 4)	54
5.13	Contour plot di temperatura nel caso della paraffina 50 (Simulazione 8)	54
5.14	confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 4 e 8).	54
5.15	confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazione 4 e 8).	54
5.16	Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4, 6)	56
5.17	Contour plot di temperatura nel caso delle sfere di diametro 1 cm (Simulazione 1)	57
5.18	Contour plot di temperatura nel caso delle sfere di diametro 2 cm (Simulazione 6)	57
5.19	Contour plot di temperatura nel caso delle ellissoidi (Simulazione 4)	57
5.20	Contour plot di temperatura nel caso delle sfere bimodali (Simulazione 3)	57
5.21	confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4 e 6).	58
5.22	confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4 e 6).	58
5.23	confronto tra le varianze della temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4 e 6).	58
5.24	confronto tra le varianze della temperatura nel PCM in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4 e 6).	58
5.25	Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8, 5)	59
5.26	Contour plot di temperatura nel caso delle sfere di diametro 1 cm (Simulazione 2)	60

5.27	Contour plot di temperatura nel caso delle sfere di diametro 2 cm (Simulazione 5)	60
5.28	Contour plot di temperatura nel caso delle ellissoidi (Simulazione 8)	60
5.29	Contour plot di temperatura nel caso delle sfere bimodali (Simulazione 7)	60
5.30	confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8 e 5).	61
5.31	confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8 e 5).	61
5.32	confronto tra le varianze di temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8 e 5).	61
5.33	confronto tra le varianze di temperatura nel PCM in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8 e 5).	61
5.34	Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11)	63
5.35	Contour plot di temperatura nel caso di temperatura in inlet pari a 350 K (Simulazione 1)	63
5.36	Contour plot di temperatura nel caso di temperatura in inlet pari a 363 K (Simulazione 11)	63
5.37	confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11).	64
5.38	confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11).	64
5.39	confronto tra le varianze di temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11).	64
5.40	confronto tra le varianze di temperatura nel PCM in funzione di f_l tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11).	64

Acronimi

PV

Photovoltaic

CSP

Concentrated Solar Power

IEA

International Energy Agency

CFD

Computational Fluid Dynamics

TES

Thermal Energy Storage

PBLHTES

Packed Bed Latent Heat Thermal Energy Storage

STES

Sensible Thermal Energy Storage

LTES

Latent Thermal Energy Storage

PCM

Phase Change Material

HTF

Heat Transfer Fluid

REV

Representative Elementary Volume

FVM

Finite Volume Method

SIMPLE

Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations

PDE

Partial Differential Equation

Lista dei simboli

A	Area della faccia della cella
a	area superficiale delle particelle per unità di volume
b	Termine noto nel sistema lineare discretizzato
c	Numero di Courant ($c = U\Delta t/\Delta x$)
C_p	Calore specifico a pressione costante
d	diametro caratteristico delle particelle
f_l	frazione liquida del PCM
h	coefficiente di scambio termico convettivo
H	entalpia
i	Indice spaziale della discretizzazione
k	Conducibilità termica
k_{eff}	conducibilità termica efficace
L	Calore latente di cambiamento di fase
m	portata massica
n	Livello temporale della discretizzazione
N	Numero totale di celle del dominio computazionale
p	Pressione del fluido / potenza termica
Q	energia termica accumulata
r	coordinata radiale
S	Superficie che delimita il volume di controllo
S_ϕ	Termine sorgente della variabile scalare ϕ
S_{porous}	Termine sorgente che rappresenta la resistenza del mezzo poroso
t	tempo
T	temperatura
\bar{T}	temperatura media
T_m	Temperatura di fusione del PCM
U	Vettore velocità del fluido
u	velocità del fluido
U, V, W	Componenti della velocità lungo le direzioni cartesiane x, y, z

V	Volume
W, P, E	Celle adiacenti (west, point, east) nella discretizzazione monodimensionale
w, e, s, n, b, t	Facce della cella (west, east, south, north, bottom, top)
x	coordinata assiale
Δt	Passo temporale della simulazione
Δx	Passo spaziale nella discretizzazione monodimensionale
Γ	Coefficiente diffusivo nella generica equazione di trasporto
$\Psi(r)$	Funzione limitatrice dello schema limitedLinear
∇	Operatore gradiente
$\nabla \cdot$	Operatore divergenza
α	Coefficiente di resistenza lineare del mezzo poroso (legge di Darcy–Forchheimer)
β	Coefficiente di resistenza quadratica del mezzo poroso (termine di Forchheimer)
ε	porosità del letto impaccato
λ	calore latente di fusione
μ	Viscosità dinamica del fluido
ν	Viscosità cinematica ($\nu = \mu/\rho$)
ϕ	Variabile scalare generica trasportata (es. temperatura, concentrazione)
ϕ_l	Frazione liquida del PCM
ρ	densità
σ_T^2	varianza della temperatura
τ	tempo adimensionale
τ_c	tempo caratteristico di carica

Introduzione

Lo sviluppo economico e sociale a livello globale è strettamente legato alla possibilità di disporre di energia accessibile, sicura e adeguata; in molte delle applicazioni legate alla produzione di energia non c'è però un'esatta corrispondenza temporale tra disponibilità e domanda e ciò può comportare inefficienze significative, in quanto parte dell'energia prodotta viene sprecata o non utilizzata in modo ottimale [1]. Inoltre, per ridurre i rischi ambientali e combattere il cambiamento climatico, stiamo assistendo ad un notevole aumento dell'utilizzo di fonti energetiche rinnovabili, le quali sono però particolarmente soggette a tali sfasamenti. Solo nel 2024 la capacità installata di energia rinnovabile nel mondo è cresciuta del 15%: in particolare l'eolico è aumentato di oltre l'11% e il solare, inteso sia come fotovoltaico (PV-photovoltaic) che come solare termico (CSP-concentrated solar power), del 32% [2], coprendo l'11% della produzione elettrica mondiale e superando il carbone che ne costituisce invece il 10% [3]. Nei prossimi anni il loro ruolo diventerà ancora più centrale: secondo le più recenti analisi dell'Agenzia Internazionale dell'Energia (IEA) la capacità installata di energie rinnovabili è destinata a crescere molto più rapidamente rispetto al passato, soprattutto grazie al solare, che da solo rappresenterà la maggior parte delle nuove installazioni di energia pulita. Esso spicca, infatti, come principale motore di questa espansione perché i suoi costi sono tra i più bassi nella maggior parte dei paesi, richiede tempi di autorizzazione relativamente brevi e gode di ampia accettazione sociale [4]. Questa tecnologia presenta però un carattere intrinsecamente intermittente, dovuto alla variabilità non programmabile delle condizioni atmosferiche e ciò comporta un'ulteriore sfida per il suo sviluppo e la sua diffusione [5]. Al contempo, il crescente interesse nella riduzione delle emissioni e nell'efficienza energetica dei processi industriali ha portato una maggiore attenzione sulle tecnologie per il recupero del calore residuo che permettono di sfruttare l'energia termica altrimenti dispersa nei processi produttivi. Tuttavia, nei flussi di calore di scarto provenienti dai processi industriali sono spesso presenti variazioni della potenza termica ed inoltre il recupero di calore può produrre energia termica in eccesso o in difetto rispetto a quella immediatamente richiesta dal processo. Ciò influisce negativamente sul funzionamento dell'impianto e sulla sua sostenibilità economica [6]. Negli ultimi

decenni sono dunque stati sviluppati vari sistemi di accumulo di energia termica (TES - thermal energy storage) capaci di immagazzinare energia e di rilasciarla quando necessario, rappresentando una soluzione efficace sia per l'integrazione di fonti rinnovabili come il solare, in particolare nelle applicazioni termodinamiche (CSP), che per la valorizzazione del calore residuo. Disaccoppiando la generazione dall'utilizzo dell'energia, i TES aumentano la flessibilità del sistema, riducono l'impatto ambientale e contribuiscono a una maggiore efficienza energetica complessiva [7].

Tra le diverse configurazioni di TES i letti impaccati per lo stoccaggio di energia termica tramite accumulo di calore latente (PBLTES-packed-bed latent thermal energy storage) rappresentano una soluzione tecnologicamente interessante. Tuttavia, il comportamento termico e fluidodinamico di tali sistemi è particolarmente complesso: il mezzo poroso risultante dall'impaccamento delle particelle genera interazioni tra flusso, scambio termico e cambiamento di fase, difficili da descrivere in modo dettagliato a scala microscopica con modelli matematici semplificati. Per questo motivo, l'impiego della Computational Fluid Dynamics (CFD) rappresenta uno strumento fondamentale per analizzare in maniera approfondita i fenomeni locali e valutare l'influenza dei diversi parametri operativi e geometrici sulle prestazioni dello storage. Alla luce di queste considerazioni, il presente lavoro di tesi si propone di ottimizzare i sistemi PBLTES utilizzando la CFD per studiare come differenti parametri influenzino l'efficienza complessiva del processo di accumulo. Di seguito è riportata una descrizione generale dei capitoli che costituiscono la tesi:

- Capitolo 1: classificazione dei vari sistemi di stoccaggio termico e descrizione approfondita dei principi base e delle caratteristiche dei PBLTES.
- Capitolo 2: rassegna dello stato dell'arte relativo ai sistemi PBLTES.
- Capitolo 3: approfondimento degli aspetti teorici della fluidodinamica computazionale (CFD) così come applicata nel presente lavoro e descrizione dei solver utilizzati.
- Capitolo 4: descrizione del set-up delle simulazioni.
- Capitolo 5: presentazione e discussione dei risultati ottenuti.

Capitolo 1

Packed bed Latent Heat Thermal Energy Storage (PBLHTES)

1.1 Classificazione dei sistemi di stoccaggio di energia termica

I sistemi di accumulo di energia termica possono essere suddivisi in tre tipologie principali:

- **Sistemi di accumulo di calore sensibile (STES - Sensible Thermal Energy Storage):** in questa tipologia l'energia termica viene immagazzinata attraverso la variazione di temperatura di un materiale, senza cambiamenti di fase. I materiali più utilizzati sono l'acqua (per basse e medie temperature) e materiali solidi come rocce, sabbia o calcestruzzo (per temperature elevate). Questa tipologia è tecnologicamente matura ed è impiegata in impianti di riscaldamento, produzione di acqua calda sanitaria, sistemi solari termici e applicazioni industriali grazie alla semplicità di costruzione, affidabilità ed economicità. La principale limitazione è la bassa densità energetica volumetrica, che richiede grandi volumi di accumulo [8].
- **Sistemi di accumulo di calore latente (LTES-latent thermal energy storage):** si tratta di un tipo di accumulo in cui l'energia termica viene immagazzinata a temperatura quasi costante attraverso il cambiamento di fase di un materiale, generalmente da solido a liquido o viceversa. I materiali più utilizzati come PCM sono sali fusi, paraffine o idrati salini, scelti in base alla temperatura di esercizio desiderata. Grazie all'alta densità energetica

volumetrica, questa tipologia di stoccaggio può accumulare grandi quantità di energia in volumi relativamente ridotti rispetto agli stoccaggi a calore sensibile. Essi trovano applicazione soprattutto in impianti di riscaldamento, di climatizzazione, nei sistemi solari termici e i processi industriali in cui lo spazio è limitato o è importante mantenere una temperatura quasi costante [7].

- **Sistemi di accumulo termochimico (TCTES - Thermochemical Thermal Energy Storage):** questi sistemi si basano su reazioni chimiche reversibili o processi di sorbimento per immagazzinare l'energia termica sotto forma di potenziale chimico, offrendo una densità energetica significativamente superiore e perdite di calore inferiori rispetto ai metodi di accumulo sensibile o latente. La ricerca attuale si concentra su materiali con temperature di ricarica inferiori a 140 °C, come zeoliti, gel di silice e idrati salini, che risultano particolarmente idonei per l'integrazione stagionale grazie alla capacità di conservare l'energia per lunghi periodi senza degrado significativo. Nonostante le elevate potenzialità tecniche per la decarbonizzazione, l'efficacia pratica di questi sistemi dipende ancora criticamente dalla selezione dei materiali, dall'ottimizzazione degli scambiatori di calore e dalle condizioni climatiche locali, risultando ancora in uno stato embrionale del loro sviluppo [9].

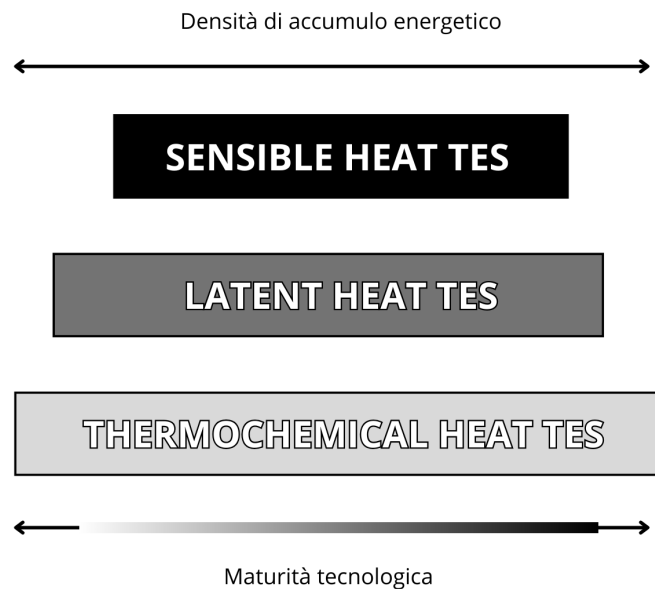


Figura 1.1: Tipologie di sistemi di stoccaggio di energia termica

Attualmente la tipologia più diffusa è quella degli STES, ma poiché la loro densità di accumulo energetico è bassa essi richiedono ampie superfici e di conseguenza un'economia poco vantaggiosa: i materiali a cambiamento di fase sono in grado di immagazzinare da 5 a 14 volte più calore per unità di volume rispetto ai materiali che accumulano calore sensibile. Per quanto riguarda i TCTES, la ricerca attuale è ancora a livello di verifica dei principi, mentre l'applicazione commerciale su larga scala richiede tempo. In questo contesto, gli LTES risultano particolarmente interessanti, perché offrono la possibilità di combinare una maggiore densità energetica rispetto agli STES con un livello di sviluppo più maturo rispetto ai TCTES. [10].

1.2 Fondamenti fisici dell'accumulo a calore latente

Come precedentemente accennato, l'accumulo di calore latente si basa sull'assorbimento e il rilascio di energia termica che avviene quando un materiale subisce un cambiamento di fase. Il cambiamento di fase può avvenire in diverse forme: solido–solido, solido–liquido, solido–gas e liquido–gas ma tra queste, la transizione solido–liquido è quella più conveniente dal punto di vista economico per i sistemi di accumulo di energia termica. Sebbene il calore latente associato a questa trasformazione sia inferiore rispetto a quello delle transizioni liquido–gas, essa comporta una variazione di volume molto contenuta, generalmente inferiore al 10%, rendendola più semplice da gestire dal punto di vista progettuale [11]. La capacità di accumulo di un sistema di accumulo termico a calore latente (LHTES) basato su un processo solido–liquido è espressa dalla seguente relazione:

$$Q = m \left[\int_{T_i}^{T_m} C_{p,s} dT + \lambda + \int_{T_m}^{T_f} C_{p,l} dT \right] \quad (1.1)$$

Dove $C_{p,s}$ e $C_{p,l}$ sono rispettivamente i calori specifici della fase solida e della fase liquida, λ il calore latente, T_i la temperatura iniziale, T_f la temperatura finale e T_m è la temperatura di fusione del materiale. Il primo termine rappresenta il calore sensibile accumulato dal materiale allo stato solido fino alla temperatura di fusione, il termine centrale indica il calore latente specifico associato al cambiamento di fase e l'ultimo termine descrive invece il calore sensibile accumulato dal materiale allo stato liquido dopo la fusione [12].

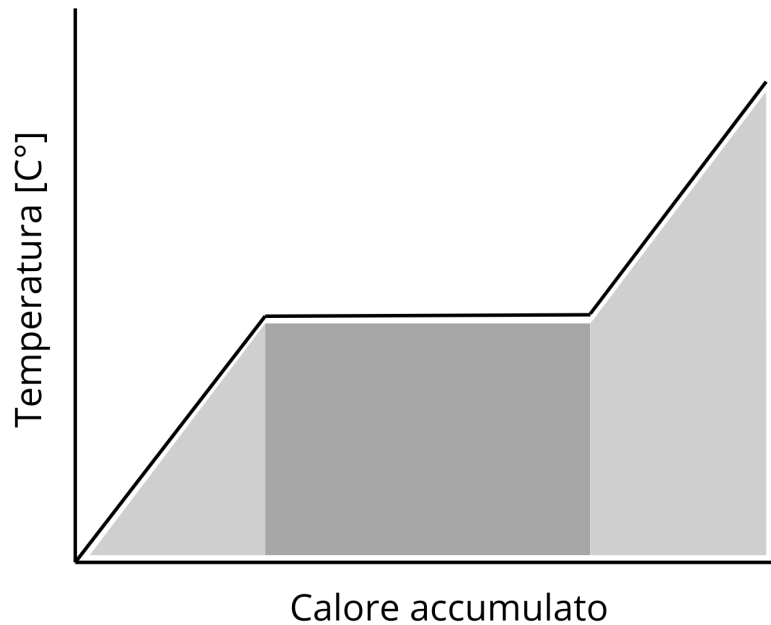


Figura 1.2: Capacità di accumulo di un sistema di accumulo termico a calore latente

1.3 Phase Change Material (PCM)

Elemento fondamentale dei sistemi di accumulo termico a calore latente sono i PCM (Phase Change Material), materiali progettati per accumulare e rilasciare energia termica sfruttando un cambiamento di fase, nella maggior parte dei casi tra solido e liquido. La caratteristica che li rende particolarmente interessanti rispetto ai materiali per accumulo di calore sensibile è il fatto che durante il passaggio di fase la temperatura rimane quasi costante, mentre viene assorbita o rilasciata una quantità elevata di energia sotto forma di calore latente. Questo consente di immagazzinare una quantità maggiore di energia senza aumentare lo spazio occupato e di funzionare in intervalli di temperatura specifici. Ciò risulta particolarmente utile in situazioni come il controllo della temperatura negli edifici, l'energia solare termica o il recupero del calore residuo. Un buon PCM per essere considerato tale deve soddisfare una serie di caratteristiche termiche, fisiche, chimiche ed economiche che vengono riportate in Tabella 1.1 [12]

Categoria	Proprietà desiderate
Proprietà termiche	<ul style="list-style-type: none">– Temperatura di cambiamento di fase adatta all'applicazione– Elevato calore specifico– Elevato calore latente– Alta conducibilità termica sia nella fase liquida che solida
Proprietà fisiche	<ul style="list-style-type: none">– Alta densità– Sottoraffreddamento minimo o assente durante la solidificazione– Bassa pressione di vapore– Piccola variazione di volume
Proprietà chimiche	<ul style="list-style-type: none">– Stabilità chimica prolungata– Compatibilità con i materiali a contatto– Non tossico– Non infiammabile– Non esplosivo
Proprietà economiche	<ul style="list-style-type: none">– Abbondantemente disponibile– Economico

Tabella 1.1: Proprietà desiderate di un PCM

1.3.1 Classificazione PCM

Per classificare i materiali a cambiamento di fase, si utilizza spesso un criterio basato sulla loro natura chimica. I materiali vengono quindi divisi in tre gruppi principali: organici, inorganici ed eutettici. Questa classificazione è molto importante perché ognuno di questi gruppi ha caratteristiche termiche, vantaggi e limiti molto diversi. Ciò influenza notevolmente le aree in cui possono essere utilizzati i materiali.

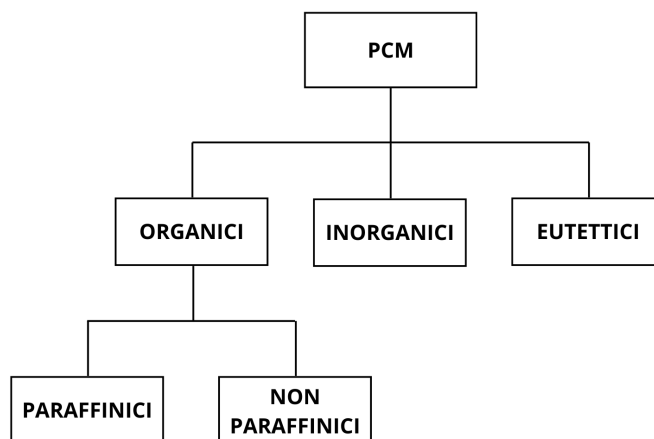


Figura 1.3: classificazione dei PCM sulla base della natura chimica

- **PCM Organici** I materiali di cambio di fase organici sono composti a base di carbonio e includono principalmente paraffine ma anche materiali non paraffinici come acidi grassi, esteri, alcoli e alcuni polimeri come il polietilenglicole. Le paraffine sono comunque i materiali di cambio di fase organici più comuni e studiati; si tratta di miscele di alcani a catena lunga con una formula generale che è C_nH_{2n+2} . Essi presentano temperature di fusione che possono essere modificate variando la lunghezza della catena molecolare e ciò li rende particolarmente versatili in quanto diventa possibile scegliere una paraffina in base alla temperatura di applicazione desiderata. Dal punto di vista termico, le paraffine hanno un buon calore latente di fusione, mostrano un comportamento molto stabile nel tempo e soprattutto fondono e solidificano in modo congruente, senza separazione di fase. Inoltre, le paraffine non soffrono praticamente di sottoraffreddamento, sono chimicamente inerti e non corrosive nei confronti dei materiali da costruzione, il che le rende particolarmente adatte per varie applicazioni. Le paraffine sono quindi un materiale molto affidabile e sicuro. Per questo motivo sono spesso utilizzate in applicazioni di tipo civile, come il controllo della temperatura interna degli edifici o i sistemi di condizionamenti dell'aria. I materiali organici non paraffinici hanno proprietà termiche simili a quelle delle paraffine, con calori latenti anche molto elevati, e hanno il vantaggio di essere spesso derivati da fonti rinnovabili, come ad esempio gli oli vegetali o i grassi animali. Tuttavia, questi materiali sono generalmente più costosi rispetto alle paraffine, possono avere odori sgradevoli e, in alcuni casi, una stabilità chimica leggermente inferiore rispetto alle paraffine. I materiali di cambio di fase organici hanno però anche alcuni svantaggi, come la bassa conducibilità che può rallentare il processo di assorbimento e rilascio del calore

e, per alcuni, l'alta infiammabilità. Un altro limite è che la quantità di energia che possono immagazzinare per unità di volume è inferiore rispetto ai materiali di cambio di fase inorganici e ciò significa che, per immagazzinare la stessa quantità di energia, sono necessari volumi più grandi. [12]

- **PCM Inorganici** I materiali a cambiamento di fase inorganici rappresentano un'altra ampia categoria che include principalmente i sali idrati, ma anche metalli, leghe e alcuni materiali inorganici solidi. Rispetto ai materiali a cambiamento di fase organici, quelli inorganici hanno alcuni vantaggi come un calore latente di fusione più elevato, una migliore capacità di condurre il calore, il fatto che non sono infiammabili e sono spesso anche più economici, in quanto derivanti da sali che sono facili da trovare. I sali idrati sono particolarmente interessanti perché fondono a temperature precise e ben definite e ciò li rende utili per molte applicazioni. Questi hanno un alto livello di energia per unità di volume, il che li rende ideali per sistemi di accumulo di energia più compatte. Per quanto riguarda invece gli svantaggi dei PCM inorganici, uno dei problemi più conosciuti è che questi materiali tendono a solidificare a temperature più basse di quella di fusione, il che significa che il calore viene rilasciato più lentamente. Un altro limite importante è che alcuni sali idrati possono separarsi in fasi diverse, il che può far diminuire le prestazioni termiche del materiale ogni volta che si passa dallo stato solido a quello liquido e viceversa. Inoltre, molti materiali di cambio di fase inorganici hanno proprietà corrosive, il che richiede una scelta molto attenta dei materiali che li contengono e aumenta la complessità del sistema. Per questo motivo, i materiali di cambio di fase inorganici sono spesso utilizzati in applicazioni industriali o ad alta temperatura, come il recupero di calore di scarto o l'accumulo termico nei processi energetici, dove i vantaggi in termini di densità energetica superano le difficoltà di gestione dei materiali di cambio di fase inorganici. [13]
- **PCM Eutettici** Esiste anche una terza categoria, costituita dai PCM eutettici. Questi sono miscele di due o più componenti, che possono essere organici, inorganici o una combinazione di entrambi. Il vantaggio principale dei PCM eutettici è che hanno un punto di fusione più controllabile rispetto ai materiali puri. Per quanto riguarda le loro proprietà termiche, questi materiali possono offrire una buona capacità di accumulo di calore e un comportamento che si mantiene costante nel tempo. Ciò significa che possono essere utilizzati in modo efficace per assorbire e rilasciare calore in modo ripetibile e prevedibile. Dall'altro lato, le cose si complicano quando si tratta di mettere a punto questi sistemi: i costi possono essere più alti e spesso non si hanno abbastanza informazioni sui dati termofisici, il che rende più difficile progettare i sistemi di accumulo in modo preciso. Questo significa che la progettazione dei sistemi di accumulo richiede un'attenta valutazione dei costi e delle informazioni

disponibili, come i dati termofisici, per essere efficace. [14] La scelta del materiale da utilizzare per il PCM dipende sempre dalle esigenze specifiche dell'applicazione in cui verrà utilizzato e non c'è un materiale che sia perfetto e che soddisfi tutti i requisiti, come ad esempio una grande capacità di accumulo di energia, una buona conducibilità, una stabilità chimica, la sicurezza e un costo contenuto. I PCM organici sono preferiti quando si ricerca la stabilità e la facilità di utilizzo, mentre quelli inorganici sono preferiti quando è necessaria una grande densità energetica. I PCM eutettici, invece, offrono la possibilità di lavorare con temperature di fusione molto precise.

In questo lavoro di tesi si tratterà in particolare di sistemi che utilizzano PCM organici paraffinici.

1.3.2 Incapsulamento

Per gestire l'integrazione dei PCM all'interno di una struttura per lo stoccaggio termico è ampiamente utilizzata la tecnica dell'incapsulamento. Essa permette sia di evitare la dispersione del PCM nel liquido termovettore sia di aumentare l'aria di scambio tra i due.

Esistono 3 tipi di incapsulamento in base alle dimensioni della capsula [12]:

- macroincapsulamento: il PCM viene contenuto in capsule di dimensioni relativamente grandi ($>1\text{mm}$) costituite principalmente da materiali metallici o plastici e disponibili in varie forme. Si tratta della tecnologia più semplice ed economica ed infatti è la più diffusa a livello commerciale.
- microincapsulamento: consiste nel racchiudere il materiale in capsule di piccole dimensioni ($0\text{-}1000\ \mu\text{m}$), e disporle in una matrice continua. Questo tipo di capsule sono costituite da materiali come l'urea-formaldeide (UF), la melamina-formaldeide (MF) poliuretani (PU) e si ottengono tramite varie tecniche come la coacervazione, polimerizzazione in sospensione o in emulsione e la poliaddizione. Esse possono essere usate direttamente come scambiatori di calore o incorporate in materiali da costruzione. Il microincapsulamento infatti è molto usato in campi come l'edilizia, i tessuti tecnici, il cosmetico e il farmaceutico.
- nanoincapsulamento: incapsulamento in scala nanometrica (fino a $100\ \text{nm}$), estremamente promettente a livello di prestazioni termiche ma ancora in fase di laboratorio per cui necessita di ulteriori ricerche prima di un'applicazione commerciale su larga scala.

1.4 Architettura dei sistemi di stoccaggio di calore latente a letto impaccato

Un sistema di accumulo di calore latente può essere sviluppato sottoforma di diverse architetture, tra cui anche i più classici sistemi di scambio termico come gli scambiatori a piastre e gli shell and tube.

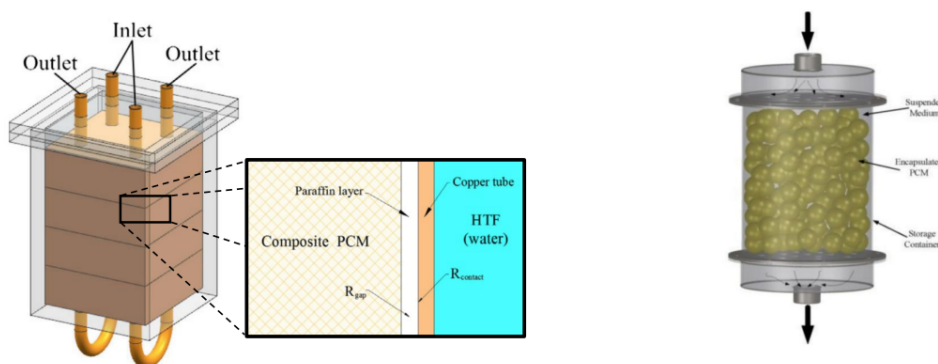


Figura 1.4: LTES Shell&Tube [15]; LTES Packed Bed [10]

Tra le varie possibili configurazioni i sistemi a letto impaccato spiccano per prestazioni termiche e affidabilità. Essi sono costituiti da un contenitore, solitamente cilindrico, in cui sono arranziate un vasto numero di macrocapsule di PCM, tra le quali viene fatto passare un fluido termovettore HTF (Heat Transfer Fluid), ovvero un mezzo che trasferisce l'energia termica da e verso il sistema di accumulo attraverso la superficie di scambio tra il fluido e il PCM. L'HTF può essere sia gassoso che liquido. Nel primo caso si tratta quasi sempre di aria, la quale ha il vantaggio di essere economica e chimicamente stabile; tuttavia, l'aria possiede una bassa conducibilità termica e un ridotto coefficiente di scambio termico, perciò il flusso d'aria deve essere molto elevato quando viene utilizzata come fluido termovettore. Gli HTF liquidi presentano invece un'elevata conducibilità termica, un alto coefficiente di scambio termico con la capsula e una forte capacità di trasferimento di calore; tra i più comuni troviamo l'acqua [16].

Un sistema di questo tipo funziona sostanzialmente secondo le seguenti modalità [14]:

- **Modalità di carica:** La carica si avvia quando il fluido termovettore, riscaldato dal sistema di raccolta, circola ad una temperatura superiore a quella di fusione del materiale a cambiamento di fase (PCM). In genere termina quando il PCM è completamente fuso; ma se la temperatura del fluido in ingresso rimane superiore a quella di fusione, l'accumulo non si ferma e prosegue come accumulo di calore sensibile.

- **Modalità di scarica:** La scarica inizia quando nel sistema circola un fluido termovettore freddo, la cui temperatura di ingresso è inferiore a quella di fusione del PCM, che si riscalda grazie al calore latente rilasciato dalla solidificazione del PCM. Questa modalità termina quando il PCM è completamente solidificato.
- **Modalità standby:** Si tratta di una fase di transizione tra la modalità di carica e quella di scarica e si ha quando non si sta più accumulando energia perché il sistema di stoccaggio è carico ma non è ancora necessaria la modalità di scarica, oppure perché l'energia viene fornita direttamente all'utilizzatore senza passare dallo stoccaggio.

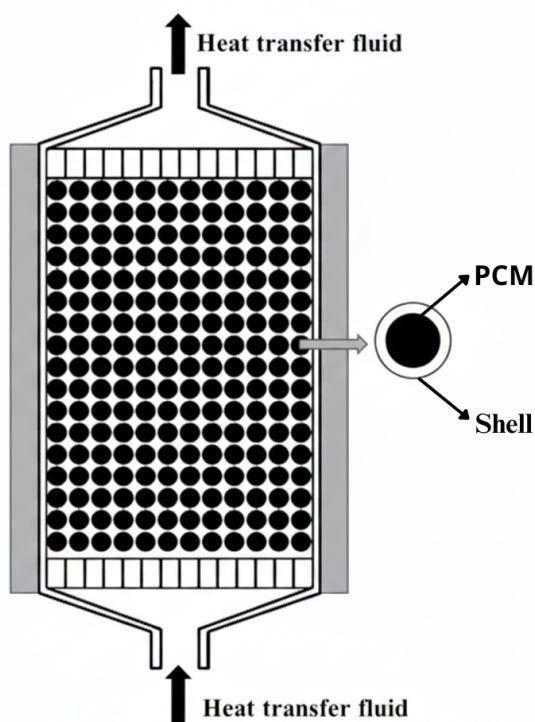


Figura 1.5: Componenti di un PBLHTES [16]

Dal punto di vista fisico, il funzionamento di un sistema PBLHTES è governato dall'interazione e dai fenomeni di trasporto che avvengono tra il fluido termovettore e le capsule di PCM. Mentre l'HTF attraversa il letto impaccato, il calore viene trasportato attraverso due meccanismi: il primo è la convezione nell'HTF, ovvero il trasporto dovuto al movimento del fluido, il secondo è la conduzione che avviene nel fluido, attraverso la superficie di contatto tra la capsula e il fluido e all'interno del PCM stesso e che permette al calore di diffondersi all'interno del materiale. Quando

la temperatura del PCM supera il punto di fusione, si innesca il cambiamento di fase: il materiale solido assorbe energia sotto forma di calore latente, fondendo a temperatura costante fino a completare la transizione. Analogamente, durante la scarica, il PCM cede calore al fluido solidificandosi, e il calore latente rilasciato viene trasportato attraverso conduzione e convezione nel fluido circostante. Questa combinazione di trasporto convettivo e conduttivo nel fluido, conduzione all'interno delle capsule, e assorbimento o rilascio di calore latente durante il cambiamento di fase determina l'efficienza complessiva del sistema e la velocità con cui l'energia può essere accumulata o rilasciata.

Il comportamento termico di PBLHTES è influenzato da vari parametri, che possono essere suddivisi nelle seguenti categorie:

- Proprietà fisiche del PCM: come già detto nella sezione apposita, le caratteristiche intrinseche del materiale come il calore latente, la capacità termica specifica, la conducibilità termica, la densità, la temperatura di fusione/solidificazione e la stabilità termica, determinano in parte le prestazioni del PBLHTES. Ad esempio, un calore latente più elevato permette di immagazzinare più energia per unità di massa, mentre una maggiore conducibilità termica accelera il trasferimento di calore, migliorando l'efficienza complessiva del sistema. [17]
- Incapsulamento del PCM: forma e dimensioni delle capsule contenenti il PCM influiscono direttamente sulla velocità di trasferimento di calore e sull'efficienza complessiva del dispositivo. [16]
- Condizioni dell'HTF: i parametri operativi del fluido che passa attraverso il letto, che comprendono la temperatura di alimentazione e la portata del fluido, svolgono un ruolo chiave nell'assorbimento o nel rilascio del calore da parte del sistema: un flusso più alto può accrescere la velocità di trasferimento del calore ma riduce il tempo di contatto con i PCM. [18]

È possibile valutare le prestazioni di un sistema di accumulo di calore latente attraverso vari criteri.

Un primo indicatore da considerare è la frazione di liquido di PCM (o di solido nel caso di modalità di scarica) presente nel sistema, la quale restituisce l'informazione dell'effettivo avanzamento del processo. Poiché nelle applicazioni di stoccaggio di calore è spesso richiesto di concludere le varie fasi del processo in un certo periodo di tempo, un altro parametro importante è quello del tempo di carica τ_c (o di scarica), ovvero il tempo necessario per concludere un ciclo di carica del sistema e quindi la completa fusione del PCM presente nel letto e la velocità di carica p (o di scarica) del sistema, definita come il rapporto tra l'energia accumulata dall'HTF

(o dal PCM) Q e il tempo di carica τ_c :

$$p = \frac{Q}{\tau_c} = \frac{\int_0^{\tau_c} m c_{p\text{HTF}} [T_{\text{HTF,in}}(t) - T_{\text{HTF,out}}(t)] dt}{\tau_c} \quad (1.2)$$

Dove $c_{p\text{HTF}}$ è il calore specifico dell'HTF e $T_{\text{HTF,in}}$ e $T_{\text{HTF,out}}$ sono rispettivamente la temperatura in ingresso e in uscita dell'HTF. [16]

Capitolo 2

Stato dell'arte

Negli ultimi anni la letteratura scientifica ha mostrato un interesse crescente verso i sistemi di stoccaggio di calore latente a letto impaccato; non solo dal punto di vista sperimentale ma anche in termini di modellazione e simulazione numerica utilizzata per l'analisi globale delle prestazioni e anche per la comprensione dettagliata dei fenomeni di trasferimento di calore e delle implicazioni progettuali legate alla geometria dell'impaccamento. La necessità di descrivere in modo accurato le prestazioni di carica e scarica di un PBLHTES come risultato della complessa interazione tra i vari parametri fisici e geometrici del sistema ha guidato lo sviluppo di modelli matematici di crescente complessità.

2.1 Modelli a singola fase

I primi modelli sviluppati trattavano il letto impaccato come un sistema monofase, assumendo che il fluido e il solido condividessero istantaneamente la stessa temperatura. Questa ipotesi risulta accettabile solo nel caso di materiali ad elevata conducibilità termica o capsule di dimensioni estremamente ridotte. Tuttavia, poiché la maggior parte dei PCM utilizzati presenta conducibilità termiche relativamente basse, tale approssimazione introduce errori significativi nella previsione dei tempi di carica e scarica. Di conseguenza, l'utilizzo dei modelli monofase è oggi limitato a studi preliminari o a condizioni operative particolari. [19]. L'equazione di bilancio energetico dei modelli monofase può essere scritta come:

$$\varepsilon \rho_{HTF} C_{p,HTF} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \right) + (1 - \varepsilon) \rho_{PCM} \frac{\partial H}{\partial t} = k_{eff,x} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + k_{eff,r} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (2.1)$$

Dove ε è la porosità del letto, H l'entalpia, ρ_{HTF} e ρ_{PCM} sono rispettivamente la densità del fluido termovettore e del materiale a cambiamento di fase, $C_{p,HTF}$ il

calore specifico del fluido termovettore, $k_{eff,x}$ e $k_{eff,r}$ sono la conducibilità termica efficace in direzione assiale e in direzione radiale. Il primo termine sul lato sinistro dell'espressione rappresenta l'incremento di energia termodinamica e il termine convettivo dell'HTF, mentre il secondo termine rappresenta l'energia assorbita dal PCM. I due termini sul lato destro rappresentano i contributi di conduzione termica nelle direzioni assiale e radiale del serbatoio [16].

2.2 Modelli a due fasi

Nei modelli a due fasi il fluido termovettore (HTF) e il materiale a cambiamento di fase (PCM) vengono descritti come due domini distinti che scambiano calore tra loro. Questi modelli sono generalmente più realistici rispetto ai modelli monofase, poiché tengono conto delle differenti proprietà termiche dei due mezzi. Tra i principali modelli a due fasi utilizzati per descrivere sistemi di accumulo termico latente (LTES) con PCM incapsulato si trovano il modello di Schumann, il modello a fase solida continua e il modello di dispersione concentrica [20].

2.2.1 Modello di Schumann

Il modello di Schumann rappresenta uno dei primi approcci sviluppati per descrivere il trasferimento di calore nei letti porosi. Esso è costituito da due equazioni principali che descrivono la conservazione dell'energia nel fluido termovettore e nel materiale a cambiamento di fase incapsulato. Esso non considera la conducibilità termica tra la fase liquida e quella solida, il che semplifica notevolmente la complessità della soluzione. Di conseguenza, il modello di Schumann richiede uno sforzo computazionale relativamente basso; tuttavia, l'accuratezza nella descrizione della distribuzione di temperatura del fluido e del letto impaccato risulta relativamente limitata.

Per l'HTF:

$$\varepsilon \rho_{HTF} C_{p,HTF} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \right) = a h_{PCM-HTF} (T_{PCM} - T_{HTF}) \quad (2.2)$$

Per il PCM:

$$(1 - \varepsilon) \rho_{PCM} \frac{\partial H}{\partial t} = a h_{PCM-HTF} (T_{HTF} - T_{PCM}) \quad (2.3)$$

Dove il parametro a rappresenta l'area superficiale delle particelle per unità di volume di PCM, u la velocità del fluido termovettore e $h_{PCM-HTF}$ il coefficiente di scambio termico tra PCM e HTF. Tuttavia, la conducibilità termica del PCM è molto bassa e trascurare la resistenza termica dovuta alla conduzione nel PCM rappresenta un'approssimazione poco accurata nelle simulazioni. [16]

2.2.2 Modello del Solido Continuo

Il modello a fase solida continua considera la diffusione del calore tra le capsule di PCM. In questo approccio il trasferimento termico può avvenire direttamente da una capsula all'altra, mentre non viene considerata la diffusione radiale all'interno delle capsule stesse [16].

Per l'HTF:

$$\begin{aligned} \varepsilon \rho_{HTF} C_{p,HTF} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \right) = a h_{PCM-HTF} (T_{PCM} - T_{HTF}) + \\ + k_{HTF,x} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + k_{HTF,r} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Per il PCM:

$$\begin{aligned} (1 - \varepsilon) \rho_{PCM} \frac{\partial H}{\partial t} = a h_{PCM-HTF} (T_{HTF} - T_{PCM}) + k_{PCM,x} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \\ + k_{PCM,r} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

In alcune formulazioni le capsule di PCM vengono trattate con un approccio lumped, assumendo quindi che non vi siano gradienti di temperatura né all'interno delle capsule né tra di esse. [20]

2.2.3 Modello di Dispersione Concentrica

Il modello di dispersione concentrica scompone il trasferimento di calore tra il fluido termovettore (HTF) e il materiale a cambiamento di fase (PCM) in due fasi: il trasferimento di calore per convezione all'esterno della capsula e la conduzione del calore all'interno della capsula. Per ciascuno strato viene quindi scritta un'equazione discretizzata di conservazione dell'energia per l'HTF. Tale equazione include un termine sorgente che accoppia il fluido con la capsula di PCM. [16] Per l'HTF:

$$\varepsilon \rho_{HTF} C_{p,HTF} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} \right) = a h_{PCM-HTF} (T_{PCM} - T_{HTF}) + k_{HTF} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2.6)$$

Per il PCM:

$$\rho_{PCM} C_{p,PCM} \frac{\partial T}{\partial t} = k_{PCM} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (2.7)$$

Essendo l'unico modello in grado di analizzare la distribuzione della temperatura all'interno della capsula, il modello di dispersione concentrica ha ricevuto molta attenzione. A partire da esso sono stati sviluppati modelli semplificati come l'Averaged Capsule Model il quale assume che, in regimi di forte advezione, il

comportamento di tutte le capsule possa essere descritto da una singola "capsula media", riducendo il costo computazionale con precisione paragonabile a quella del modello completo [20].

2.3 Limiti dei modelli macroscopici e ruolo della fluidodinamica computazionale

I modelli macroscopici descritti permettono di ottenere stime rapide dei principali parametri di interesse ma presentano limiti significativi, soprattutto quando si richiede una comprensione dettagliata dei fenomeni locali e della dipendenza della prestazione dalla geometria del letto poichè perdono informazioni sui dettagli locali del flusso e della distribuzione di temperatura all'interno del letto impaccato. Questo approccio non consente di catturare fenomeni come il riscaldamento non uniforme delle capsule di PCM o del fluido termovettore e gli effetti delle interazioni tra capsule adiacenti: tali dettagli che possono influenzare le prestazioni del sistema vengono inevitabilmente trascurati. Un altro limite dei modelli macroscopici risiede nella necessità di utilizzare correlazioni empiriche per rappresentare fenomeni complessi, come la resistenza al flusso nei letti impaccati e il trasferimento di calore tra il fluido e le particelle di PCM. Queste correlazioni, derivanti da dati sperimentali su geometrie specifiche, introducono un'incertezza significativa quando applicate a configurazioni diverse o a materiali con proprietà variabili. Di conseguenza, la predittività del modello è limitata. I modelli macroscopici inoltre non sono in grado di rappresentare in modo accurato la dipendenza del comportamento del letto impaccato dalla geometria delle capsule, dalla loro distribuzione e dal loro orientamento limitando la possibilità di prevedere comportamenti non lineari dovuti a configurazioni geometriche complesse. Tali modelli dunque, offrendo un compromesso tra semplicità e accuratezza, risultano utili per una prima analisi globale del sistema ma la perdita di informazioni locali, la dipendenza da correlazioni empiriche e l'incapacità di considerare in dettaglio la geometria delle particelle riducono l'affidabilità in applicazioni dove il dettaglio microscopico può essere importante. Per superare tali limitazioni la simulazione CFD con risoluzione delle singole particelle risulta utile per ottenere previsioni più precise e una comprensione approfondita dei fenomeni termofluidodinamici nei letti impaccati di PCM. Per tale motivo in questo lavoro di tesi si opererà un'analisi CFD di PBLHTES.

Capitolo 3

Metodi numerici

In questo studio di tesi si vuole modellare numericamente un sistema di stoccaggio di calore latente mediante letti impaccati attraverso simulazioni CFD condotte utilizzando il software openFOAM (Open-source Field Operation And Manipulation). In generale, una simulazione CFD condotta con openFOAM si articola in tre fasi principali. La prima è il pre-processing, durante il quale vengono definiti il dominio di calcolo, la mesh, le proprietà fisiche del sistema e le condizioni iniziali e al contorno. Segue la fase di esecuzione del solver, in cui il solutore appropriato viene lanciato per calcolare l'evoluzione spaziale e temporale delle variabili di interesse. openFOAM, il cui codice sorgente è liberamente accessibile e modificabile, permette all'utente non solo di utilizzare solver già disponibili, ma anche di svilupparne altri personalizzati per la risoluzione di problemi specifici. I solver di openFOAM sono implementati in linguaggio C++ e utilizzano il metodo dei volumi finiti per la discretizzazione delle equazioni di trasporto. Infine, nella fase di post-processing, i risultati vengono analizzati e visualizzati mediante strumenti grafici come ParaView oppure attraverso funzioni integrate all'interno di openFOAM.

3.1 foamCase

Tutte le informazioni necessarie per avviare una simulazione CFD in openFOAM sono organizzate all'interno di una struttura di directory denominata FoamCase. Ogni caso di studio è quindi rappresentato da una cartella contenente un insieme minimo di sottocartelle, ciascuna dedicata a una specifica fase o aspetto della simulazione. La struttura tipica di un FoamCase comprende le seguenti directory principali:

- La cartella **0** (talvolta indicata come time directory iniziale) contiene un file per ciascuna variabile di interesse, come pressione, velocità e temperatura. All'interno di questi file vengono definite le unità di misura della grandezza, le

condizioni iniziali e le condizioni al contorno. OpenFOAM consente di applicare differenti tipologie di boundary condition, valide sia per campi scalari sia vettoriali, come ad esempio `fixedValue`, che impone un valore assegnato sulla superficie del dominio, `zeroGradient`, che impone un gradiente nullo nella direzione normale alla parete, oppure `symmetry`, che riflette la soluzione rispetto a un piano di simmetria.

- La cartella **constant** raccoglie tutte le informazioni che non variano nel tempo durante la simulazione. In essa è presente la sottocartella `polyMesh`, che contiene la descrizione completa della griglia computazionale attraverso file quali `points`, `faces`, `owner`, `neighbour` e `boundary`. Nella directory `constant` vengono inoltre definite le proprietà fisiche del sistema, come viscosità, diffusività o conducibilità, e il modello di flusso adottato.
- La cartella **system** contiene una serie di file di configurazione, detti `dictionary`, che forniscono al software tutte le informazioni procedurali necessarie all'esecuzione della simulazione. Tra questi, i file imprescindibili sono:
 - `controlDict`, in cui vengono specificati i parametri temporali della simulazione, come il tempo di inizio e di fine, il numero di iterazioni o `time step`, la frequenza di salvataggio dei risultati e l'eventuale utilizzo di `functionObject` per il post-processing automatico;
 - `fvSchemes`, che definisce gli schemi di discretizzazione spaziale e temporale utilizzati dal solver per le operazioni di gradiente, divergenza, laplaciano e termini temporali;
 - `fvSolution`, in cui sono indicati i solutori numerici da impiegare, i criteri di convergenza, le tolleranze e i fattori di sottorilassamento per ciascuna variabile.

A questi file si affiancano comunemente altri `dictionary`, come `blockMeshDict`, utilizzato per la definizione del dominio computazionale e la generazione di mesh strutturate, e `snappyHexMeshDict`, impiegato per la creazione di mesh non strutturate a partire da geometrie complesse, specificando i livelli di raffinamento e i criteri di qualità della griglia.

Oltre alla directory iniziale 0, openFOAM gestisce i risultati della simulazione attraverso una serie di cartelle temporali, comunemente denominate `time directory`. Durante l'esecuzione del solver, il software salva i campi calcolati a ogni iterazione o a intervalli prefissati, seguendo le istruzioni specificate nel `controlDict`, creando automaticamente nuove directory il cui nome corrisponde al valore del tempo

simulato. In ciascuna di queste cartelle vengono memorizzati i file relativi alle variabili di interesse con la stessa struttura dei file presenti nella directory iniziale. Nel caso di simulazioni transitorie, le time directory rappresentano l'evoluzione temporale della soluzione e consentono di analizzare l'andamento delle variabili nel tempo, mentre per simulazioni stazionarie, oltre l'effettiva soluzione arrivata a convergenza, possono fornire una sequenza di soluzioni intermedie, utili per valutare il processo di convergenza.

3.2 Metodo dei volumi finiti

Il metodo dei volumi finiti citato nell'introduzione di questo capitolo (in quanto utilizzato nei solver di openFOAM) è un approccio numerico per la risoluzione delle equazioni differenziali alle derivate parziali, comunemente impiegata nella fluidodinamica computazionale (CFD). La sua applicazione prevede la suddivisione del dominio di calcolo in una mesh, ovvero un insieme finito di regioni di controllo denominate celle, al cui interno le grandezze fisiche vengono rappresentate mediante un valore medio. Questo metodo consente di convertire un problema formulato tramite equazioni differenziali, come quelli presi in esame, in un sistema di equazioni algebriche risolvibili numericamente. Esso si basa sull'integrazione delle equazioni di conservazione su ciascun volume di controllo garantendo in modo naturale il rispetto dei bilanci di massa, quantità di moto ed energia, in quanto i termini di trasporto vengono espressi come flussi attraverso le superfici delle celle. Il flusso che attraversa una faccia comune a due celle adiacenti è infatti unico, e contribuisce con segno opposto ai bilanci delle due celle, assicurando la conservazione globale delle proprietà fisiche. Un ulteriore vantaggio del metodo è la sua applicabilità a mesh non strutturate, consentendo la discretizzazione anche di domini geometricamente complessi. L'equazione di conservazione di una variabile scalare generica ϕ può essere scritta nella seguente forma:

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (3.1)$$

dove ρ è la densità del fluido, \mathbf{U} il vettore velocità, Γ il coefficiente diffusivo e S_ϕ un termine sorgente. Nel caso di regime stazionario il termine temporale di accumulo viene trascurato. Integrando l'equazione su un generico volume di controllo V e applicando il teorema della divergenza ai termini convettivo e diffusivo, si ottiene una formulazione integrale in cui compaiono esclusivamente flussi attraverso la superficie S che delimita la cella:

$$\int_V \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_S \rho \phi \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dS = \int_S \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS + \int_V S_\phi dV \quad (3.2)$$

Nel metodo dei volumi finiti gli integrali di superficie vengono approssimati come somma dei contributi sulle singole facce della cella. Assumendo una cella

tridimensionale con facce identificate come west (w), east (e), south (s), north (n), bottom (b) e top (t), il termine convettivo può essere espresso in forma discreta come:

$$\int_S \rho \phi \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dS = \rho \left[(AU\phi)_w - (AU\phi)_e + (AV\phi)_s - (AV\phi)_n + (AW\phi)_t - (AW\phi)_b \right] \quad (3.3)$$

dove A rappresenta l'area della faccia e U , V e W sono le componenti della velocità lungo le direzioni cartesiane. In maniera analoga, il contributo diffusivo può essere approssimato valutando il gradiente della variabile scalare sulle facce della cella:

$$\int_S \Gamma \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS = - \left[A\Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w - A\Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e + A\Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s - A\Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n + A\Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_t - A\Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_b \right] \quad (3.4)$$

Poiché nel metodo dei volumi finiti le variabili scalari vengono calcolate unicamente nel centro geometrico delle celle, i valori di ϕ e del suo gradiente sulle facce devono essere ricavati tramite opportune tecniche di interpolazione a partire dai valori noti nei centroidi. Il termine sorgente viene infine approssimato assumendo un valore medio uniforme all'interno del volume di controllo:

$$\int_V S_\phi dV \approx S_\phi V \quad (3.5)$$

Al termine della discretizzazione, l'equazione di conservazione assume una forma puramente algebrica, che può essere risolta mediante algoritmi numerici iterativi. [21]

3.3 Schemi di discretizzazione

Come precedentemente accennato, nel metodo dei volumi finiti è necessario ricavare il valore delle variabili sulle facce a partire da quelli calcolati nelle celle.

3.3.1 Discretizzazione spaziale

Nel modello implementato in openFOAM, i termini convettivi relativi al campo di velocità sono stati discretizzati mediante lo schema *linearUpwind*, mentre per il trasporto termico è stato adottato lo schema *limitedLinear*, entrambi con formulazione di secondo ordine ma con caratteristiche di stabilità differenti.

Per spiegare il funzionamento degli schemi citati si considera una griglia monodimensionale uniforme con centri di cella W , P ed E , e si vuole determinare il valore della variabile scalare ϕ sulla faccia est della cella P (e), assumendo flusso

diretto verso destra.

Lo schema *linearUpwind* effettua una ricostruzione lineare della variabile a partire dalla cella a monte. Il valore alla faccia è ottenuto mediante uno sviluppo di Taylor al primo ordine:

$$\phi_e = \phi_P + (x_e - x_P) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_P \quad (3.6)$$

Il gradiente in P è approssimato con differenze centrate:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_P = \frac{\phi_E - \phi_W}{x_E - x_W} \quad (3.7)$$

Assumendo passo uniforme h :

$$x_E - x_P = x_P - x_W = h \quad (3.8)$$

si ottiene:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{\phi_E - \phi_W}{4} \quad (3.9)$$

Lo sviluppo di Taylor mostra che l'errore dominante è proporzionale a h^2 , confermando l'accuratezza del secondo ordine.

Lo schema *limitedLinear*, scelto per il trasporto termico, mantiene una ricostruzione lineare ma introduce un limitatore sul gradiente. Anche in questo caso il valore alla faccia viene ricostruito a partire dalla cella a monte:

$$\phi_e = \phi_P + \Psi(r) (x_e - x_P) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_P \quad (3.10)$$

dove $\Psi(r)$ è una funzione limitatrice e r rappresenta il rapporto tra gradienti consecutivi lungo la direzione del flusso:

$$r = \frac{\phi_P - \phi_W}{\phi_E - \phi_P} \quad (3.11)$$

Il limitatore modula il contributo del termine lineare:

- se la soluzione è regolare ($r \approx 1$), allora $\Psi(r) \approx 1$ e lo schema si comporta come una discretizzazione lineare di secondo ordine;
- se sono presenti forti variazioni o cambi di concavità, $\Psi(r)$ si riduce verso zero e lo schema tende a un comportamento di tipo upwind, più dissipativo ma numericamente stabile.

In questo modo si ottiene un compromesso tra accuratezza e robustezza: lo schema resta del secondo ordine nelle regioni lisce del campo termico, ma evita la formazione di oscillazioni non fisiche in prossimità di strati limite o gradienti elevati di temperatura.

È stata inoltre utilizzata l'opzione *bounded*. Con tale formulazione si impone che la variabile trasportata rimanga entro limiti fisicamente ammissibili. Dal punto di vista numerico, ciò significa modificare la discretizzazione convettiva affinché il valore calcolato alla faccia non produca nuovi massimi o minimi locali.

3.3.2 Discretizzazione temporale

Le simulazioni condotte in questo lavoro di tesi sono eseguite in regime transitorio, rendendo quindi necessario l'utilizzo di uno schema di discretizzazione temporale. In particolare, è stato adottato il metodo di Eulero implicito, uno schema numerico del primo ordine caratterizzato da stabilità incondizionata.

Il metodo consente di calcolare il valore della variabile scalare ϕ al tempo successivo $n + 1$, a partire dai valori noti al tempo n , secondo la relazione:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \Delta t \left(-U \frac{\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} + \Gamma \frac{\phi_{i+1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) \quad (3.12)$$

dove l'indice i si riferisce alla discretizzazione spaziale, mentre l'indice n indica il livello temporale. Per rendere l'equazione più compatta, si introducono il numero di Courant c e il numero di diffusione adimensionato d :

$$c = \frac{U\Delta t}{\Delta x}, \quad d = \frac{\Gamma\Delta t}{\rho\Delta x^2} \quad (3.13)$$

Sostituendo questi parametri nello schema di Eulero implicito si ottiene:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{c}{2} (\phi_{i+1}^{n+1} - \phi_{i-1}^{n+1}) + d (\phi_{i+1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1}) \quad (3.14)$$

che può essere riscritta come:

$$(1 + 2d)\phi_i^{n+1} + \left(\frac{c}{2} - d\right)\phi_{i+1}^{n+1} + \left(-\frac{c}{2} - d\right)\phi_{i-1}^{n+1} = \phi_i^n \quad (3.15)$$

Riscrivendo l'equazione in una notazione più compatta, si ottiene:

$$a_P\phi_P = a_W\phi_W + a_E\phi_E + b, \quad (3.16)$$

dove $P = i$, $W = i - 1$ ed $E = i + 1$ e i coefficienti assumono i valori:

$$a_P = 1 + 2d, \quad a_W = d + \frac{c}{2}, \quad a_E = d - \frac{c}{2}, \quad b = \phi_i^n \quad (3.17)$$

Il sistema lineare risultante può essere rappresentato in forma matriciale tridiagonale:

$$\begin{bmatrix} a_P & a_E & 0 & \cdots & 0 \\ a_W & a_P & a_E & \cdots & 0 \\ 0 & a_W & a_P & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_W & a_P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1^{n+1} \\ \phi_2^{n+1} \\ \phi_3^{n+1} \\ \vdots \\ \phi_N^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1^n \\ \phi_2^n \\ \phi_3^n \\ \vdots \\ \phi_N^n \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

dove N rappresenta il numero totale di celle in cui è stato suddiviso il dominio computazionale. La risoluzione di questo sistema può avvenire tramite metodi iterativi, come il Gauss–Seidel, consentendo di calcolare l’evoluzione temporale di ϕ all’interno delle celle. [22]

3.4 Solver

I solver sono i pacchetti di codici adibiti alla risoluzione di un problema specifico. In questo lavoro in particolare per la risoluzione del campo di moto stato impiegato il solver porousSimpleFoam, uno dei solver messi a disposizione da openFOAM, mentre per la simulazione del trasferimento di calore in sistemi bifase costituiti da fluido termovettore e PCM incapsulato è stato appositamente sviluppato il solver PCMFoam.

3.4.1 porousSimpleFoam

Per risolvere il campo di moto nel sistema in esame è stato utilizzato il solver PorousSimpleFoam, una variante del solver simpleFoam. simpleFoam applica l’algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) per risolvere le equazioni che descrivono il moto di un fluido incomprimibile, accoppiando in modo iterativo i campi di velocità e pressione. Il punto di partenza è la risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes e dell’equazione di continuità:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$$

$$\mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T)$$

dove \mathbf{U} è la velocità, p la pressione, ρ la densità del fluido e $\nu = \mu/\rho$ la viscosità cinematica. I termini dell’equazione di quantità di moto rappresentano il trasporto convettivo, il gradiente di pressione e la diffusione viscosa. Nel caso dei fluidi incomprimibili, la difficoltà principale risiede nel fatto che la pressione non può essere calcolata direttamente a partire dall’equazione di continuità. L’algoritmo SIMPLE

introduce un'equazione di Poisson per la pressione, derivata dalla continuità, che mette in relazione pressione e velocità:

$$\nabla^2 p = \nabla \cdot (\rho \mathbf{U})$$

Dopo aver assegnato dei valori iniziali ai campi di pressione e velocità l'algoritmo risolve in modo iterativo l'equazione di continuità e l'equazione di Poisson fino a convergenza. PoroSimpleFoam adatta SimpleFoam per trattare flussi stazionari in mezzi porosi incompressibili introducendo $\mathbf{S}_{\text{porous}}$, un termine di sorgente, nelle equazioni di quantità di moto, che rappresenta la resistenza esercitata dal materiale poroso ed evita di risolvere esplicitamente la geometria dettagliata dei pori:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (3.19)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{U} - \mathbf{S}_{\text{porous}} \quad (3.20)$$

Il termine $\mathbf{S}_{\text{porous}}$ tiene conto della resistenza del mezzo e può essere espresso attraverso la legge di Darcy–Forchheimer come combinazione di contributi lineari e quadratici rispetto alla velocità:

$$\mathbf{S}_{\text{porous}} = \alpha \mathbf{U} + \beta |\mathbf{U}| \mathbf{U} \quad (3.21)$$

dove μ è la viscosità dinamica del fluido; α è il coefficiente di resistenza lineare, dominante nei regimi laminari; ρ è la densità del fluido; β è il coefficiente di resistenza quadratica, rilevante nei regimi turbolenti o ad alta velocità. Il solver porousSimpleFoam consente la definizione di più zone porose all'interno dello stesso dominio, ognuna con caratteristiche specifiche di resistenza. Nel capitolo 3 sarà descritto nel dettaglio in che modo è stato utilizzato questo solver nella risoluzione del campo di moto del sistema in esame.

3.4.2 PCMFoam

Per risolvere i fenomeni termici è stato utilizzato il solver PCMFoam, sviluppato appositamente per la simulazioni di sistemi a due fasi costituiti da un fluido e da un materiale a cambiamento di fase. PCMFoam risolve il problema del trasporto di calore attraverso un'equazione di bilancio dell'energia che tiene conto del trasporto convettivo, della diffusione e del contributo del calore latente durante il cambiamento di fase accoppiata ad un'equazione che descrive il cambiamento di fase stesso:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T\mathbf{U}) \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \rho L \frac{\partial \phi_\ell}{\partial t}, \quad (3.22)$$

$$\rho L \frac{\partial \phi_\ell}{\partial t} = [\nabla \cdot (k \nabla T) + \rho C_p \nabla \cdot (T\mathbf{U})] f_m, \quad (3.23)$$

dove f_m è un flag binario che definisce le condizioni di fusione o solidificazione del PCM,

- Se $T > T_m$ e $\varphi_\ell < 1$: $f_m = 1$;
- Se $T < T_m$ e $\varphi_\ell > 0$: $f_m = 1$.

Nel pratico f_m è implementato tramite la funzione `foam::pos(x)`, che restituisce 0 se $x \leq 0$ e 1 se positiva, nel seguente modo:

$$f_m = [\text{pos}(\varphi_\ell) \text{pos}(T_m - T) + \text{pos}(1 - \varphi_\ell) \text{pos}(T - T_m)] \text{flagSolid} \quad (3.24)$$

Il primo termine è uguale a 1 quando ($\text{pos}(\varphi_\ell > 0) = 1$) il PCM non è completamente solido e la temperatura è sotto il punto di fusione ($\text{pos}(T_m - T) > 0$), indicando quindi che il PCM si trova nella condizione per cui deve avvenire o proseguire la solidificazione. Il secondo termine è uguale a 1 quando ($\text{pos}(1 - \varphi_\ell) > 0$) il PCM non è completamente liquido e la temperatura è sopra il punto di fusione ($\text{pos}(T - T_m) > 0$), indicando quindi che il PCM si trova nella condizione per cui deve avvenire o proseguire la fusione. Inoltre, il `flagSolid` è necessario per considerare il cambiamento di fase solo nelle celle contenenti il PCM. In questo modo, il calore assorbito o ceduto durante il cambiamento di fase viene correttamente incluso nella soluzione dell'equazione della temperatura. Per garantire la convergenza del coupling esplicito tra le due equazioni, `PCMFoam` esegue più iterazioni per passo temporale, sfruttando il loop `correctNonOrthogonal`. Questo approccio consente di simulare sistemi di accumulo termico a scala microscopica con PCM incapsulato, trattando in modo efficiente sia il trasporto convettivo nel fluido sia il cambiamento di fase nelle capsule.

Capitolo 4

Set-up delle simulazioni

4.1 Campagna di simulazioni

In questa sezione viene presentato il set di simulazioni numeriche adottato con l'obiettivo di analizzare l'influenza delle principali variabili che governano il processo di carica termica del sistema, mantenendo al contempo una struttura di confronto coerente tra i diversi casi analizzati. In particolare, nello studio vengono analizzati l'effetto del materiale a cambiamento di fase, della geometria delle capsule di PCM che costituiscono il letto impaccato e della temperatura in ingresso del fluido termovettore. I parametri non oggetto di studio, come le proprietà del fluido, il regime fluidodinamico e le impostazioni numeriche, sono stati mantenuti costanti in tutte le simulazioni, così da poter attribuire le differenze nei risultati esclusivamente alle variazioni dei parametri considerati. Di seguito vengono illustrate le scelte adottate nello studio per ognuno dei parametri analizzati e vengono inoltre mostrati i risultati riguardanti l'analisi fluidodinamica del caso.

- **Materiale:**
Per quanto riguarda il materiale di accumulo, sono stati selezionati due differenti PCM organici, caratterizzati da diverse temperature di fusione e proprietà termiche. Il primo, caratterizzato da una temperatura di fusione più bassa, presenta calore latente di fusione e calore specifico più alti del secondo, il quale presenta invece il vantaggio, specialmente quando in fase solida, di una maggiore conducibilità termica. Si riportano nella tabella 4.1 le caratteristiche di due diversi PCM:

Proprietà	paraffina 60	paraffina 50
Temperatura di fusione [K]	332.85	322.75
Calore latente di fusione [J/kg]	258.38×10^3	249.16×10^3
Calore specifico [J/(kg · K)]	2147	2040
conducibilità termica [W/(m · K)]	Liquido: 0.27 Solido: 0.53	Liquido: 0.28 Solido: 0.76
Densità [kg/m ³]	873	718

Tabella 4.1: Proprietà termofisiche dei PCM simulati [23]

- Geometria della capsula: Per quanto riguarda la geometria delle capsule sono state considerate quattro diverse configurazioni. In particolare, sono stati analizzati letti costituiti da
 - sfere di diametro pari a 1 cm
 - sfere di diametro pari a 2 cm
 - una distribuzione bimodale di sfere di diametro pari a 1 cm e 2 cm
 - ellipsoidi con volume equivalente a quello delle sfere di diametro pari a 1 cm.
- Temperatura dell'HTF: Per quanto riguarda le condizioni operative del fluido termovettore, lo studio è stato condotto considerando acqua a due differenti temperature di ingresso, in particolare a 350 K e 363 K. L'analisi a due livelli di temperatura consente di esplorare il range applicativo del sistema di accumulo, verificandone le prestazioni in condizioni operative differenti.

La combinazione dei diversi ha portato alla definizione di un set complessivo di simulazioni che permette di investigare separatamente e congiuntamente l'influenza di ciascuno di essi e fornisce una base per l'analisi e la discussione dei risultati presentati nel capitolo successivo. Il set è costituito in totale da 16 simulazioni ed è qui riportato in forma tabellare:

Simulazione	PCM	T_{in} [K]	Forma capsule	Dimensioni
1	Paraffina 60	350	Sfere	1 cm
2	Paraffina 50	350	Sfere	1 cm
3	Paraffina 60	350	Sfere	1 e 2 cm
4	Paraffina 60	350	Ellissoidi	Volume eq. sfera 1 cm
5	Paraffina 50	350	Sfere	2 cm
6	Paraffina 60	350	Sfere	2 cm
7	Paraffina 50	350	Sfere	1 e 2 cm
8	Paraffina 50	350	Ellissoidi	Volume eq. sfera 1 cm
9	Paraffina 60	363	Sfere	2 cm
10	Paraffina 60	363	Sfere	1 e 2 cm
11	Paraffina 60	363	Sfere	1 cm
12	Paraffina 50	363	Sfere	1 cm
13	Paraffina 60	363	Ellissoidi	Volume eq. sfera 1 cm
14	Paraffina 50	363	Sfere	2 cm
15	Paraffina 50	363	Sfere	1 e 2 cm
16	Paraffina 50	363	Ellissoidi	Volume eq. sfera 1 cm

Tabella 4.2: Set di simulazioni numeriche adottato per lo studio del processo di carica termica

4.2 Geometrie

Per condurre le simulazioni CFD è necessario, innanzitutto, generare le geometrie tridimensionali rappresentative delle differenti configurazioni di letto impaccato prese in esame. La generazione è stata effettuata utilizzando il software Blender, un ambiente open-source di modellazione tridimensionale. Sebbene non sia un software specificamente progettato per applicazioni CFD, esso si presta efficacemente alla generazione di geometrie complesse come i letti impaccati. In particolare sono stati generati:

- un letto impaccato di sfere monodisperse (utilizzato sia per l'impaccamento di sfere di 1 cm sia per quello di sfere di 2 cm);
- un letto impaccato di ellissoidi;
- un letto impaccato costituito da una miscela di sfere i cui diametri sono uno il doppio dell'altro;

Per tutte le configurazioni studiate, il letto impaccato è stato generato simulando la caduta delle capsule come corpi rigidi e indeformabili sotto l'azione della gravità all'interno di un contenitore cilindrico che ha funzionato da vincolo fisico, così da ottenere una disposizione rappresentativa di un sistema reale in cui le capsule vengono introdotte nel serbatoio e si assestano spontaneamente fino a raggiungere una configurazione stabile. Questo procedimento ha consentito di ottenere un impaccamento non ordinato, evitando strutture periodiche o artificialmente simmetriche.

Nel primo caso studiato il letto impaccato è costituito da capsule sferiche tutte dello stesso diametro. In Blender è stata inizialmente generata una singola sfera rappresentativa della capsula di PCM, successivamente replicata fino a ottenere il numero necessario di elementi sferici.

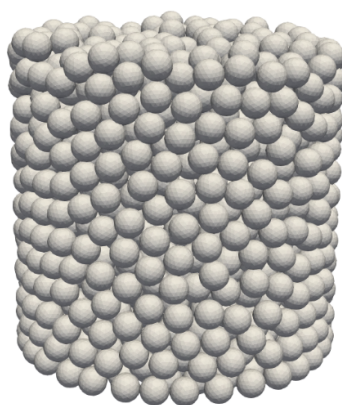


Figura 4.1: Letto impaccato di sfere monodisperse

La seconda configurazione considerata è costituita da un letto impaccato di capsule ellissoidali e anche in questo caso, è stata inizialmente generata una singola capsula ellissoidale, ottenuta modificando una geometria sferica lungo gli assi principali. In particolare le dimensioni dell'ellissoidi sono state generate in modo tale da avere un rapporto tra i 3 assi principali circa pari a 1:1:2. La capsula è stata poi replicata più volte, mantenendo costanti le dimensioni ma cambiando l'orientazione in varie direzioni per evitare allineamenti preferenziali.

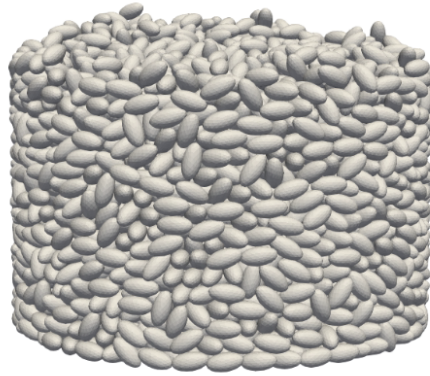


Figura 4.2: Letto impaccato di ellissoidi

La terza configurazione analizzata è costituita da un letto impaccato con distribuzione bimodale, formato da capsule sferiche di 2 diametri diversi in rapporto 1:2 tra di loro. Sono state generate le sfere delle due dimensioni in egual numero tra di loro e, prima della fase di riempimento, sono state randomizzate al fine di evitare segregazioni artificiali legate alla sequenza di inserimento. Nonostante ciò si osserva una parziale tendenza delle capsule di diametro minore ad accumularsi sul fondo del contenitore. Tale effetto non risulta particolarmente critico ai fini delle analisi CFD condotte in questo lavoro, in quanto il Representative Elementary Volume (REV) utilizzato per l'estrazione dei risultati (che sarà più dettagliatamente trattato nella sezione successiva di questo capitolo) è stato selezionato in una regione centrale del letto, sufficientemente distante sia dal fondo sia dalle pareti del contenitore.

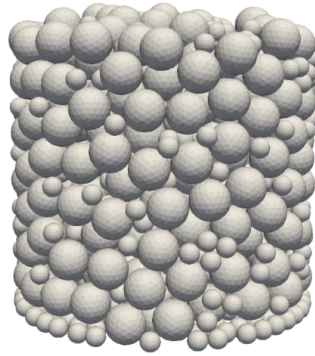


Figura 4.3: Letto impaccato con distribuzione bimodale

4.3 REV

Nello studio numerico di sistemi come i letti impaccati un aspetto fondamentale è l'individuazione di un REV, ovvero di un volume di controllo sufficientemente ampio da essere statisticamente rappresentativo della struttura, ma anche sufficientemente ridotto da risultare computazionalmente sostenibile. La determinazione del REV richiederebbe un'analisi della convergenza di grandezze medie, come ad esempio la porosità, al crescere delle dimensioni del dominio considerato così da poter identificare il volume minimo per il quale le proprietà del sistema possono essere considerate indipendenti dalla dimensione del campione analizzato. In questo lavoro la scelta del dominio di calcolo è stata guidata da risultati preliminari ottenuti in analisi puramente fluidodinamiche condotte su mezzi porosi per cui è stato osservato che un impaccamento costituito da 250 sfere consente di ottenere una stima della porosità con un errore inferiore all'1% e quindi un dominio tale può essere considerato sufficientemente rappresentativo della struttura del letto impaccato [24].

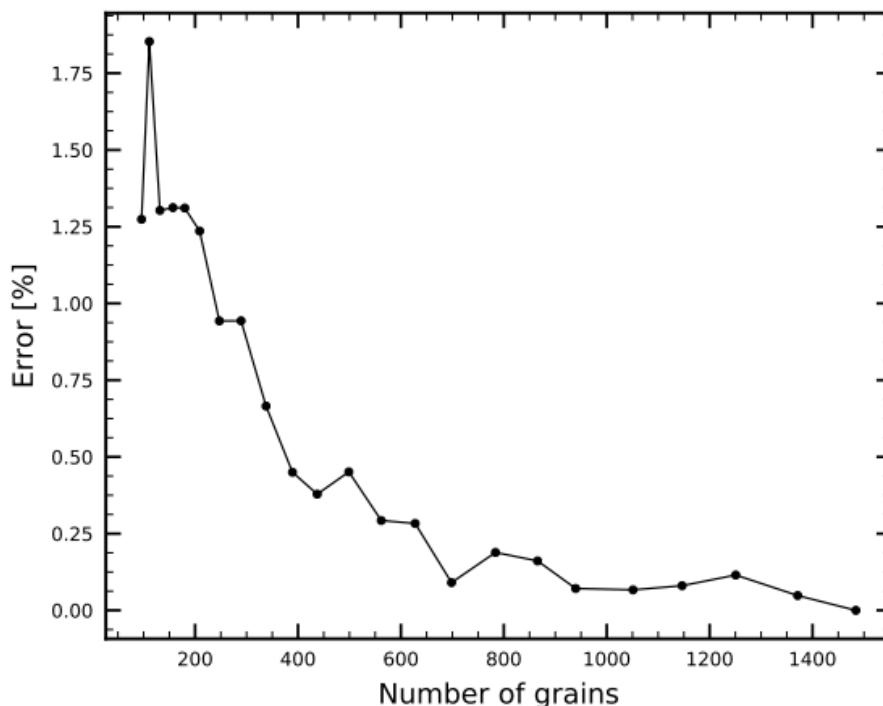


Figura 4.4: Studio del volume elementare rappresentativo: l'errore relativo sulla porosità media è riportato per 100 rappresentazioni di ciascun impaccamento, ognuna composta da un certo numero di granuli [24].

Nel presente studio, oltre alla fluidodinamica, vengono considerati anche i fenomeni di scambio termico e di fusione/solidificazione del PCM, che rendono il problema più complesso rispetto a un'analisi di solo flusso. Nonostante ciò, dato che le simulazioni sono condotte a Reynolds pari a 16, condizione nella quale il campo di moto risulta meno sensibile a fluttuazioni su piccola scala rispetto a regimi pienamente turbolenti, considerando che in questo contesto è quindi possibile tollerare un errore delle proprietà geometriche superiore all'1% senza che ciò comprometta la validità complessiva dei risultati, si è ritenuto accettabile adottare come dominio di calcolo un impaccamento di 250 capsule.

4.3.1 Sfere monodisperse

Per il letto impaccato di sfere monodisperse di raggio 1 cm, il REV è stato determinato a partire dalla porosità del letto, pari a 0.32, e dal numero di sfere necessarie a garantire un'adeguata discretizzazione. Sulla base di tali considerazioni, è stato individuato un volume di controllo pari a $1.7 \cdot 10^2 \text{ cm}^3$, corrispondente a un dominio

cubico di lato pari a 5.6 cm.

Nel caso del letto di capsule monodisperse di 2 cm, il REV adottato è pari al doppio del caso delle capsule da 1 cm, ovvero di $1.4 \cdot 10^3 \text{ cm}^3$, corrispondente a un dominio cubico di lato pari a 11.2 cm.

4.3.2 Sfere bimodali

Nel caso del letto impaccato bimodale, costituito da capsule sferiche con raggio pari a 1 cm e 2 cm in egual numero, la selezione del REV è stata effettuata sulla base di un criterio volumetrico, al fine di mantenere coerenza con il caso monodisperse di riferimento. Il volume di sfere in questa composizione risulta circa 4,5 volte maggiore rispetto a quello di sfere monodisperse di raggio 1 cm ed è stato quindi scelto un REV 4,5 volte maggiore. Questo approccio non tiene esplicitamente conto delle variazioni di porosità indotte dalla distribuzione granulometrica bimodale che possono essere considerate trascurabili. Il REV così determinato per la configurazione bimodale è pari a $7.7 \cdot 10^2 \text{ cm}^3$, corrispondente a un dominio cubico di lato pari a 9.2 cm.

4.3.3 Ellissoidi monodispersi

Per il letto impaccato di capsule ellissoidali, poichè essi sono stati generati in modo tale da mantenere lo stesso volume delle capsule sferiche, è stato adottato lo stesso REV utilizzato nel caso delle sfere monodisperse di raggio 1 cm, pari a $1.7 \cdot 10^2 \text{ cm}^3$. La porosità del letto è inferiore a quella del caso delle capsule monodisperse ($\epsilon \approx 0,28$) e mantenere invariato il volume del dominio rappresenta una scelta conservativa che assicura un livello di rappresentatività almeno equivalente a quello del caso sferico.

Le dimensioni dei REV selezionate sono dunque riassunte nella Tabella 4.3

Tipo di capsule	Raggio [cm]	Volume REV [cm^3]	Lato dominio [cm]
Sfere monodisperse	1	$1.7 \cdot 10^2$	5.6
Sfere monodisperse	2	$1.4 \cdot 10^3$	11.2
Sfere bimodali (50%-50%)	1 / 2	$7.7 \cdot 10^2$	9.2
Ellissoidi monodisperse	eq. $r = 1$	$1.7 \cdot 10^2$	5.6

Tabella 4.3: Dimensioni dei REV delle diverse configurazioni

4.4 Mesh

La generazione della mesh per le simulazioni è stata effettuata a partire dalle geometrie tridimensionali del letto impaccato di capsule di PCM, precedentemente create come descritto nella sezione 3.2 ed esportate in formato .stl. Tali geometrie rappresentano il dominio complessivo del sistema di stoccaggio di calore latente e includono sia la regione occupata dal fluido termovettore sia quella occupata dalle capsule solide contenenti il PCM. Il file .stl selezionato per ciascuna configurazione è stato inserito all'interno della cartella constant/triSurface, dove è stato duplicato al fine di gestire correttamente la modellazione di un problema multiregione. I due file sono necessari affinché uno venga utilizzato per la generazione della mesh della regione solida (capsule di PCM), mentre l'altro venga impiegato per la costruzione della mesh della regione fluida (HTF).

4.4.1 blockMesh

Una volta definite le superfici geometriche è stato utilizzata l'utility blockMesh che consente di generare una mesh strutturata di background, costituita da celle esaedriche, a partire da un singolo blocco tridimensionale. In particolare è stato definito come un parallelepipedo contenente il Representative Elementary Volume (REV) selezionato per ciascuna configurazione di impaccamento come spiegato nella sezione 3.3 e il numero di celle lungo ciascuna direzione spaziale è stato scelto in funzione del parametro Cells per Diameter (CpD), utilizzato per controllare la risoluzione spaziale in relazione alle dimensioni caratteristiche delle capsule. Questo parametro è definito come il numero delle celle (di dimensioni delle celle originarie di background, create da blockMesh) per diametro equivalente dell'oggetto impaccato. In particolare è stata selezionata un CpD pari a 16, trattandosi di un valore ritenuto sufficiente per casi di studi fluidodinamici affini a quelli analizzati in questo studio. Pur non tenendo conto in questo modo dell'influenza dei fenomeni termici sul grado di raffinamento necessario si è ritenuto sufficiente in questa fase della ricerca. Le facce del dominio sono state denominate distinguendo tra: inlet e outlet per l'ingresso e l'uscita del fluido, top, bottom, front e back per le superfici laterali.

4.4.2 snappyHexMesh

Una volta generata la mesh di background, questa è stata adattata alla geometria del letto impaccato tramite l'utility snappyHexMesh, che consente di ottenere una mesh body-fitted a partire da una discretizzazione esaedrica iniziale. Il processo di snappyHexMesh si articola in due fasi principali:

- 1 Castellation: le celle della mesh di background vengono suddivise in prossimità delle superfici geometriche al fine di migliorare la risoluzione della forma delle capsule e delle interfacce;
- 2 Snapping: i nodi della mesh vengono spostati per aderire in modo più accurato alle superfici definite nei file .stl.

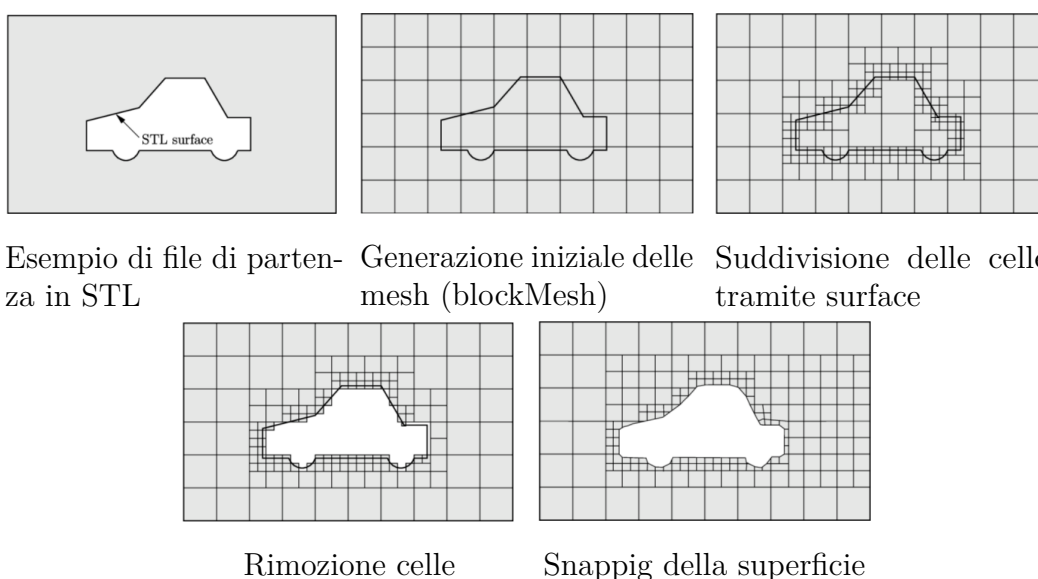
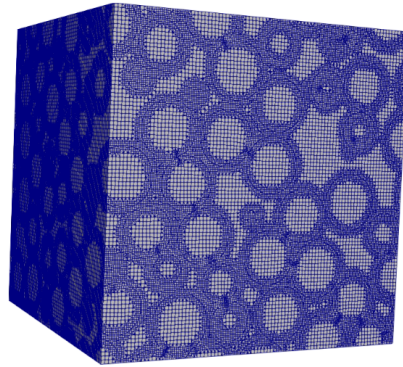
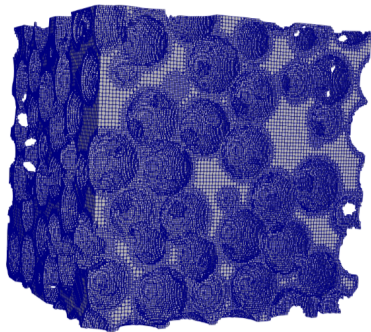


Figura 4.5: Generazione della mesh con snappyHexMesh [25]

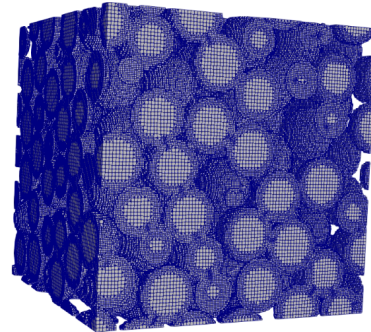
Inoltre, trattandosi di un caso biregione, è stato applicato un ulteriore affinamento in corrispondenza delle superfici di interesse, al fine di descrivere correttamente le interfacce fluido–solido. All’interno della sezione `castellatedMeshControls` del file `snappyHexMeshDict` sono state infatti definite due `refinementSurfaces`, una associata alla regione delle capsule di PCM denominata `solid` e una alla regione fluida denominata `fluid`, a partire dagli `insidePoint` indicati come punti appartenenti alle due zone da definire. Le zone generate dalla procedura di *snapping* risultano indispensabili anche per la definizione del flag `PCMFlag` utilizzato dal solver `PCMFoam` per distinguere le celle di materiale interessate al cambiamento di fase e quelle del fluido.



Mesh dell'intero dominio



Mesh della zona fluida



Mesh della zona solida

Figura 4.6: Mesh del REV di un impaccamento di sfere monodisperse

4.4.3 topoSet

Poichè l'assegnazione automatica delle regioni tramite snappyHexMesh non è completamente soddisfacente, al fine di ottenere una suddivisione delle regioni più precisa si è fatto ricorso all'utility topoSet. Questa utility consente di operare manipolazioni topologiche su una mesh già generata, permettendo di definire in modo più accurato cellZone e faceZone associati alle diverse regioni del dominio. In particolare, la logica adottata con topoSet consiste nell'identificare inizialmente le celle corrispondenti alla zona fluida a partire da un punto interno ad essa, creando una cellZone "fluid" che rappresenta l'HTF. Successivamente, è stata generata una cellZone "solid" che comprende tutte le altre celle del dominio, ottenuta invertendo la selezione delle celle di fluid, che rappresenta le capsule di PCM.

4.4.4 transformPoints

Infine, è stato utilizzato l'utility transformPoints che permette di modificare direttamente la geometria di una mesh agendo sulle coordinate dei punti che la compongono spostando la posizione spaziale dei vertici ma mantenendo invariata la sua topologia. Tramite transformPoints è stato possibile modificare le dimensioni generiche ottenute nella fase di generazione delle geometrie viste nella sezione 3.2 per ottenere le dimensioni scelte per i 4 impaccamenti selezionati per lo studio parametrico di questa tesi.

4.4.5 checkMesh

Per valutare la qualità della mesh ottenuta è stato utilizzata l'utility checkMesh. Questa utility fornisce in output una serie di parametri quantitativi utili a caratterizzare la regolarità della griglia. Tra i più significativi si annoverano l'Orthogonality (o, in modo equivalente, Non-Orthogonality), che misura l'angolo tra la normale alle facce e la linea che congiunge i centri delle celle adiacenti per cui valori elevati di non-ortogonalità indicano una marcata deviazione dalla configurazione ideale; l'Aspect ratio, che rappresenta il grado di allungamento delle celle ed è definito come il rapporto tra la dimensione massima e quella minima della cella, e la Skewness, che quantifica lo scostamento della forma della cella rispetto a quella di una cella equilatera di pari area.

4.5 Campo di moto

Come già specificato in precedenza, in una prima fase è stato risolto esclusivamente il problema fluidodinamico, trascurando l'accoppiamento con i fenomeni termici. Il campo di velocità ottenuto è stato successivamente impiegato come dato di ingresso per la simulazione dei processi di scambio termico e di cambiamento di fase. La risoluzione disaccoppiata del campo di moto implica che l'influenza dei fenomeni termici sulla fluidodinamica non venga esplicitamente considerata e ciò costituisce una semplificazione adottata per contenere la complessità del problema. La simulazione del campo di moto è stata effettuata mediante il solver `porousSimpleFoam`, descritto nella sezione 3.4.1, ed ha richiesto, come primo passo, l'impostazione delle condizioni iniziali e al contorno all'interno della directory `0/`. In particolare è stata imposta una differenza di pressione tra ingresso e uscita del dominio computazionale; questa scelta è motivata dal fatto che, in un sistema come quello in esame, la velocità non è una grandezza uniforme né facilmente controllabile, mentre la perdita di carico rappresenta una condizione più semplice da definire. Nel file relativo alla pressione è stato quindi assegnato un valore di pressione all'inlet, mentre all'outlet è stata imposta una pressione di riferimento pari a zero. Le restanti superfici del dominio sono state trattate come piani di simmetria, assumendo l'assenza di flussi e gradienti normali attraverso di esse. Per quanto riguarda la velocità, non è stato imposto alcun valore prefissato né all'ingresso né all'uscita. Su entrambe queste superfici è stata infatti utilizzata una condizione di tipo `zeroGradient`, lasciando che il campo di velocità si sviluppasse in maniera coerente con la distribuzione di pressione calcolata. Anche in questo caso, sulle altre facce del dominio è stata mantenuta la condizione di `symmetry`, in accordo con l'ipotesi di simmetria geometrica e fluidodinamica del problema. Nella configurazione reale, le celle di PCM sono racchiuse all'interno di un involucro metallico che impedisce l'ingresso del fluido. Tale involucro non è stato modellato esplicitamente dal punto di vista geometrico; tuttavia, il suo effetto è stato riprodotto introducendo una resistenza porosa estremamente elevata nelle zone corrispondenti al PCM. L'assenza di moto nelle capsule è quindi una conseguenza diretta dei coefficienti porosi adottati nel file `porosityProperties`. In particolare: è stato selezionato il modello di resistenza Darcy–Forchheimer; è stata indicata la zona di celle associata alle regioni di PCM; i coefficienti di Darcy sono stati assegnati con valori molto elevati, tali da sopprimere il moto del fluido nelle regioni interessate; i coefficienti di Forchheimer sono stati posti pari a zero. Le proprietà della fase fluida sono state assunte equivalenti a quelle dell'acqua e state definite nel file `transportProperties` come riportate nella tabella 4.4. Le simulazioni sono state calibrate in modo da ottenere un numero di Reynolds circa pari a 16, con Re definito come $Re = \frac{\rho v L}{\mu}$ dove ρ è la densità del fluido [kg/m^3], v è la velocità caratteristica del fluido [m/s], L è la lunghezza caratteristica del sistema [m] e μ è la viscosità dinamica del fluido [$\text{Pa} \cdot \text{s}$].

Proprietà	Simbolo	Valore
Densità	ρ	1000 kg m ⁻³
Calore specifico	c_p	4180 J kg ⁻¹ K ⁻¹
conducibilità termica	k	0.6 W m ⁻¹ K ⁻¹
Viscosità cinematica	ν	1.00 × 10 ⁻⁶ m ² s ⁻¹

Tabella 4.4: Proprietà termofisiche dell'HTF

Si garantiscono così condizioni di moto equivalente tra tutte le configurazioni analizzate. Per $Re < 1$ il moto è strettamente laminare e la perdita di carico è descritta in modo lineare dalla legge di Darcy. Nell'intervallo $1 < Re < 10$ iniziano a manifestarsi contributi inerziali, ma il flusso rimane sostanzialmente ordinato. Solo per valori più elevati, indicativamente intorno a $Re \approx 100$, il regime può essere considerato pienamente turbolento, con effetti inerziali predominanti e una relazione non lineare marcata tra perdita di carico e velocità [26]. Poiché nel caso in esame $Re = 16$ si colloca ancora lontano dal regime completamente turbolento e gli effetti inerziali risultano contenuti, il contributo quadratico associato ai coefficienti di Forchheimer può essere trascurato senza introdurre errori significativi. Per questo motivo tali coefficienti sono stati assunti pari a zero, come specificato precedentemente, mantenendo nella modellazione il solo termine lineare, coerente con il regime fluidodinamico considerato. Una volta completata l'impostazione del caso, il solver è stato lanciato e poiché il problema fluidodinamico è stato formulato in regime stazionario, la soluzione numerica converge verso uno stato di equilibrio rappresentativo del campo di moto nel dominio. Pressione e velocità per le quattro configurazioni sono riportati nella Tabella 4.5.

Tipologia di impaccamento	Pressione m^2/s^2	Velocità m/s
Sfere monodisperse 1 cm	0.001	0.0016
Sfere monodisperse 2 cm	0.00026	0.0008
Ellissoidi	0.00194	0.0016
Sfere bimodali	0.0004	0.00105

Tabella 4.5: Pressione in ingresso e velocità per le diverse tipologie di impaccamento.

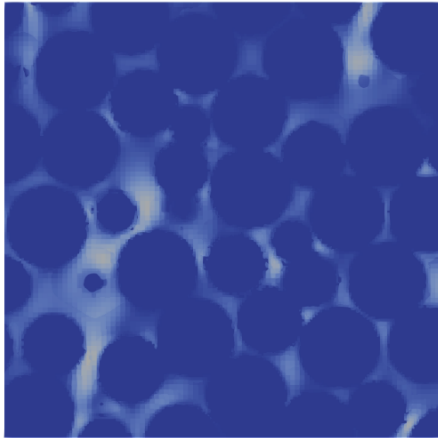


Figura 4.7: Campo di moto in sfere monodisperse di diametro 1 cm

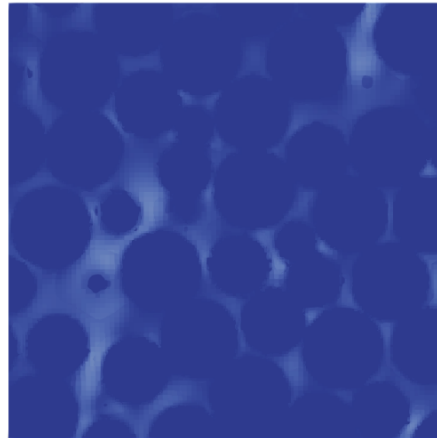


Figura 4.8: Campo di moto in sfere monodisperse di diametro 2 cm

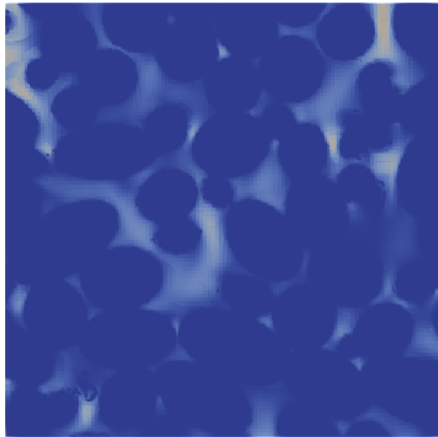
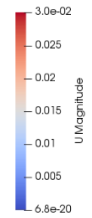


Figura 4.9: Campo di moto per ellissoidi

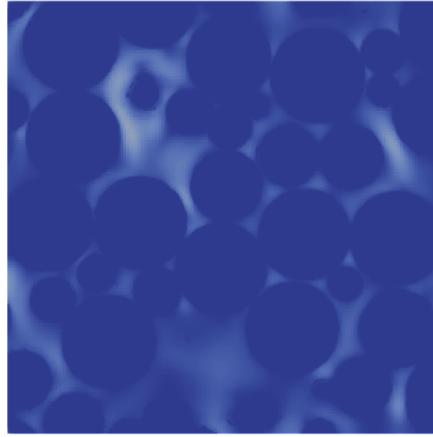
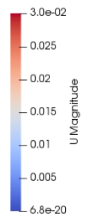


Figura 4.10: Campo di moto per sfere bimodali



4.6 Impostazione per la risoluzione dei fenomeni termici

La simulazione dei fenomeni termici è stata condotta utilizzando il solver PCMFoam descritto nella sezione 3.4.2. Innanzitutto è stato imposto come dato di ingresso il campo di moto precedentemente calcolato, assunto stazionario. In questo modo, il problema termico è stato risolto a partire da un campo di velocità già noto, consentendo di focalizzare l'analisi sugli scambi di calore tra il fluido e le capsule di PCM. Anche in questo caso, l'impostazione del problema ha richiesto la definizione delle condizioni iniziali e al contorno nella directory 0/, con particolare riferimento al campo di temperatura. All'ingresso del dominio è stata definita una condizione di temperatura fissata alla temperatura stabilita per ciascuna configurazione come descritto nella Sezione 4.1. Tale scelta, sebbene coerente con l'idea di rappresentare l'ingresso del flusso nel dominio, non è completamente rigorosa dal punto di vista fisico in quanto l'inlet del dominio non intercetta esclusivamente la regione fluida, ma attraversa anche alcune capsule di PCM presenti nella zona superiore del REV. Di conseguenza, l'imposizione di una temperatura costante su tutta la superficie di inlet comporta che una porzione del PCM risulti artificialmente vincolata alla temperatura del fluido in ingresso. Questo introduce un'approssimazione locale nel campo termico limitata alle capsule intercettate dalla superficie di inlet. Tuttavia, tale semplificazione è stata mantenuta in quanto l'errore è confinato a una regione ristretta del dominio e poichè la stessa impostazione è stata adottata in tutte le configurazioni analizzate riproducendo il medesimo errore in tutte le simulazioni e preservando dunque la validità del confronto tra le varie configurazioni.

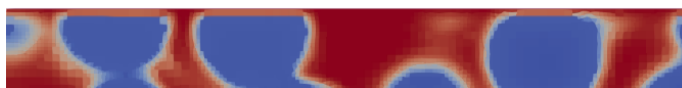


Figura 4.11: Condizione su T inlet

All'uscita è stata utilizzata una condizione di zeroGradient, in modo da non vincolare artificialmente il valore della temperatura e lasciare che essa si adattasse all'evoluzione del campo termico all'interno del dominio. Sulle restanti superfici è stata mantenuta la condizione di symmetry, in accordo con le ipotesi geometriche e fisiche già adottate per il campo di moto. L'internalField della temperatura è stato inizializzato mediante l'utilizzo dell'utility setFields. In particolare, la temperatura iniziale del fluido è stata impostata uguale alla temperatura di ingresso mentre le regioni corrispondenti alle capsule di PCM sono state inizializzate a una temperatura inferiore, pari a 320 K. Inoltre è stato necessario definire il campo che descrive lo

stato fisico del PCM. Tale stato è rappresentato dalla variabile $LbyTot$, definita come la frazione di materiale in fase liquida all'interno di ciascuna cella delle capsule di PCM. Il campo $LbyTot$ in queste simulazioni è stato inizialmente impostato a 0 in tutto il dominio delle capsule, corrispondente a una frazione liquida nulla. Le proprietà termofisiche dei materiali sono state definite nel file `transportProperties`. Per la fase fluida sono state utilizzate le proprietà già descritte in precedenza, mentre per il PCM sono stati inseriti tutti i parametri necessari alla descrizione del suo comportamento termico, in accordo con i valori riportati nella tabella di riferimento nella Sezione 4.1.

Trattandosi di simulazioni in transitorio è necessaria la definizione di un passo temporale adeguato, impostato all'interno del file `controlDict`. La scelta del valore di Δt risulta fondamentale per garantire la stabilità e l'accuratezza della soluzione numerica, in particolare in presenza di fenomeni transitori di trasporto convettivo e diffusivo. Nel presente lavoro, il passo temporale è stato selezionato tenendo conto sia del numero di Courant convettivo sia del numero di Courant diffusivo, in modo da soddisfare i criteri di stabilità associati a entrambi i meccanismi di trasporto. Il numero di Courant convettivo, indicato con Co , rappresenta il rapporto tra la distanza percorsa dal fluido in un intervallo di tempo e la dimensione caratteristica della cella di calcolo, ed è definito come:

$$Co = \frac{|\mathbf{U}| \Delta t}{\Delta x} \quad (4.1)$$

dove $|\mathbf{U}|$ è il modulo della velocità locale del fluido, Δt è il passo temporale e Δx è una dimensione caratteristica della griglia computazionale. Valori elevati del numero di Courant indicano che il fluido attraversa una o più celle in un singolo passo temporale, condizione che può compromettere la stabilità numerica della simulazione. Oltre al criterio convettivo, è stato considerato anche il numero di Courant diffusivo, che tiene conto della stabilità numerica associata ai fenomeni di diffusione termica. Tale parametro può essere espresso come:

$$Co_{diff} = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \quad (4.2)$$

dove α rappresenta la diffusività termica del materiale. Anche in questo caso, valori eccessivamente elevati del numero di Courant diffusivo possono condurre a instabilità numeriche o a una descrizione non accurata del fenomeno diffusivo. Nel presente lavoro, Δt è stato determinato considerando il criterio più restrittivo, ovvero il numero di Courant diffusivo. Imponendo tale valore pari a $Co_{diff} = 0.5$, il passo temporale è stato determinato come:

$$\Delta t = \frac{Co_{diff} \Delta x^2}{\alpha} \approx 0.01 \text{ s.} \quad (4.3)$$

In questo modo, il passo temporale adottato garantisce la stabilità numerica della simulazione e una corretta risoluzione sia dei fenomeni convettivi sia di quelli diffusivi all'interno del dominio computazionale.

Capitolo 5

Risultati e considerazioni

Segue l'analisi dei risultati relativi alle simulazioni definite nel capitolo precedente in termini di dinamica di fusione del PCM, di evoluzione del campo termico e delle prestazioni globali del sistema.

5.1 Panoramica dei parametri e delle grandezze estratte

In questa sezione vengono descritte le principali grandezze estratte dalle simulazioni numeriche e utilizzate per l'analisi comparativa tra differenti PCM e configurazioni geometriche.

- Evoluzione della frazione liquida del PCM

La frazione liquida media del PCM, denominata nel solver L_{byTot} , è definita come:

$$\bar{f}_l(\tau) = \frac{1}{V_{PCM}} \int_{V_{PCM}} f_l dV, \quad (5.1)$$

dove f_l rappresenta la frazione liquida locale e V_{PCM} il volume totale del materiale a cambiamento di fase. L'andamento viene riportato in funzione del tempo adimensionale

$$\tau = \frac{t}{t_{res}}, \quad (5.2)$$

dove t_{res} è il tempo di residenza caratteristico del fluido. Questa grandezza consente di quantificare in modo globale la velocità di fusione e di confrontare

in maniera sintetica diverse configurazioni. Un esempio tipico dell'evoluzione temporale della frazione liquida è riportato in Figura 5.1.

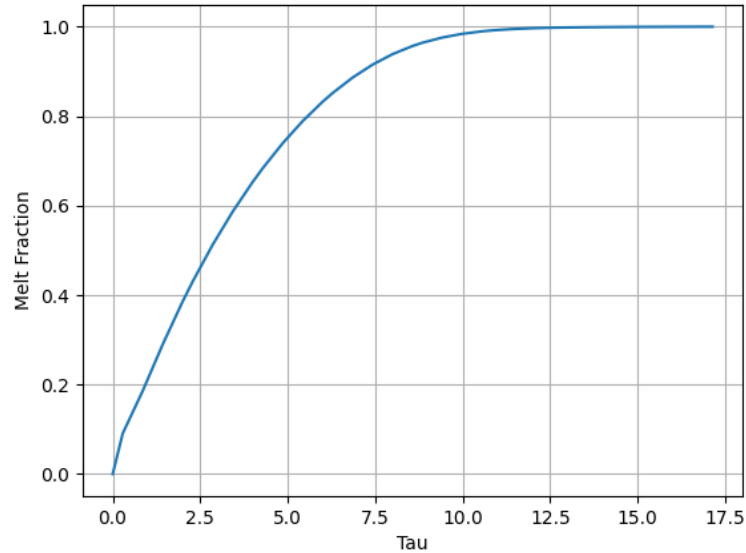


Figura 5.1: Esempio di grafico dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ (Simulazione1)

Da questo valore è possibile estrapolare il tempo di carica, definito come il tempo necessario alla completa fusione del PCM. In questo lavoro il tempo di carica è stato definito come il tempo in cui il valore f_l arriva ad un valore pari a 0.995.

- Mappe di temperatura

Mediante i contour plot della temperatura a diversi istanti rappresentativi del processo che permettono di valutare la distribuzione dei gradienti termici è possibile condurre un'analisi qualitativa del sistema. In Figura 5.2 è riportato un esempio di distribuzione di temperatura per differenti valori di f_l .

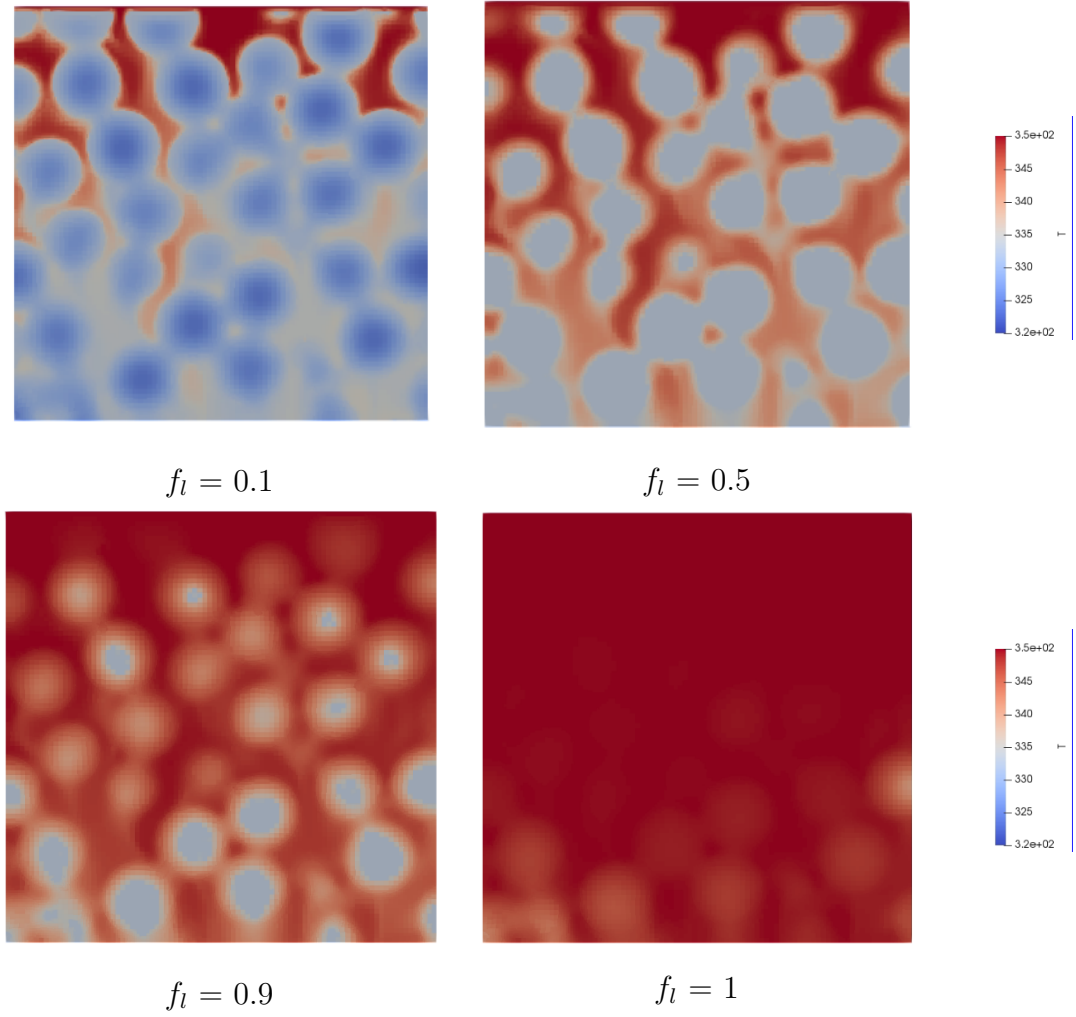


Figura 5.2: Esempio di contour plot della temperatura in corrispondenza di varie fasi del processo di carica (Simulazione1)

- **Temperatura media nel PCM e nell'HTF** Per caratterizzare l'evoluzione energetica del sistema sono state calcolate anche le temperature medie volumetriche nel PCM e nel fluido termovettore:

$$\bar{T}_{PCM}(\tau) = \frac{1}{V_{PCM}} \int_{V_{PCM}} T dV, \quad (5.3)$$

$$\bar{T}_{HTF}(\tau) = \frac{1}{V_{HTF}} \int_{V_{HTF}} T dV. \quad (5.4)$$

In Figura 5.3 è riportato un esempio dell'evoluzione della temperatura media dell'HTF e del PCM nel tempo adimensionale. Per quantificare il grado di

non uniformità termica è stata inoltre valutata la varianza della temperatura nel PCM e nell'HTF:

$$\sigma_T^2(\tau) = \frac{1}{V} \int_V (T - \bar{T})^2 dV. \quad (5.5)$$

La varianza rappresenta un indicatore diretto della presenza di gradienti termici interni: valori elevati sono associati a distribuzioni fortemente non uniformi, tipiche delle fasi iniziali del processo; al contrario, la diminuzione progressiva della varianza indica una tendenza verso l'uniformità termica. L'analisi combinata di temperatura media e varianza consente quindi di interpretare in modo più completo la dinamica di trasferimento di calore e l'efficienza di scambio tra fluido e PCM. Nei grafici in Figura 5.3 la varianza è indicata attraverso le barre verticali.

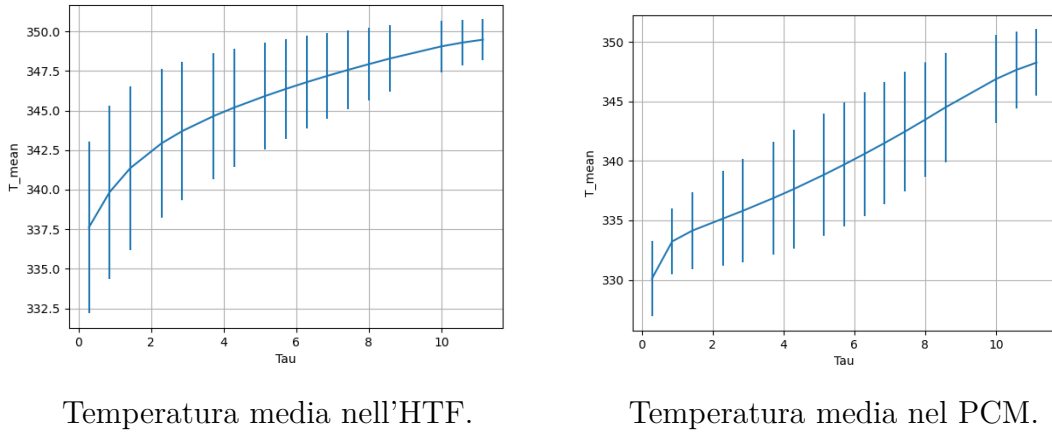


Figura 5.3: Grafici delle temperature medie in funzione del tempo adimensionale τ (Simulazione1). Le barre verticali indicano la varianza.

- **Velocità di carica** Per le varie configurazioni è stata valutata anche la velocità di carica del sistema, come definita nella Sezione 1.4. Tale parametro rappresenta l'energia trasferita al PCM per unità di tempo e costituisce un indicatore diretto dell'efficienza del processo di accumulo termico. Per confrontare in modo omogeneo diverse configurazioni e materiali, la velocità di carica è stata normalizzata secondo due criteri:
 - rispetto al volume totale del sistema, per ottenere una misura globale dell'energia immagazzinata per unità di volume complessivo;
 - rispetto al volume del PCM, per quantificare l'effettivo contributo del materiale a cambiamento di fase alla capacità di accumulo energetico.

La definizione adimensionale della velocità di carica consente quindi di confrontare in maniera sintetica differenti configurazioni indipendentemente dalle dimensioni del REV o dalla frazione di materiale a cambiamento di fase.

Le grandezze sopra descritte costituiscono la base dell'analisi comparativa presentata nei capitoli successivi. Le mappe di temperatura permettono un'interpretazione qualitativa dei meccanismi di scambio, mentre temperatura media e varianza consentono di valutare l'evoluzione termica e il grado di omogeneità del sistema. La frazione liquida e la velocità di fusione forniscono una misura globale dell'efficienza del processo.

5.2 Considerazioni sui materiali

In questa sezione si confrontano le prestazioni della Paraffina 60 e della Paraffina 50 a parità di geometria e condizioni operative. Come già introdotto nella sezione 3.1, le differenze principali tra i due materiali riguardano la temperatura di cambiamento di fase, la conducibilità termica in fase solida e i calori specifici e latenti. La Paraffina 60 fonde a $T_{m,60} = 332.75$ K, mentre la Paraffina 50 a $T_{m,50} = 322.85$ K, con una differenza di circa 9.9 K. Ciò potrebbe risultare significativo poiché modifica direttamente il salto termico tra fluido caldo e materiale. Dal punto di vista della conduzione interna, la Paraffina 50 presenta una conducibilità solida pari a $k_{50} = 0.76$ W/(m · K), superiore del 43% rispetto al valore $k_{60} = 0.53$ W/(m · K) della Paraffina 60, essendo

$$\frac{k_{50}}{k_{60}} = \frac{0.76}{0.53} \approx 1.43. \quad (5.6)$$

In fase liquida, invece, le conducibilità risultano sostanzialmente equivalenti (0.27–0.28 W/(m · K)). La Paraffina 60 presenta dunque una maggiore resistenza interna alla conduzione e ciò favorisce la Paraffina 50, soprattutto nelle prime fasi del processo quando il materiale è prevalentemente solido.

Per un confronto coerente su base volumetrica, le proprietà massiche sono state moltiplicate per la densità del solido. Il calore latente volumetrico risulta pari a

$$\rho\lambda_{60} \approx 2.26 \times 10^8 \text{ J/m}^3, \quad \rho\lambda_{50} \approx 1.79 \times 10^8 \text{ J/m}^3, \quad (5.7)$$

con una differenza dell'ordine del 26% a favore della Paraffina 60. Analogamente, la capacità termica volumetrica risulta

$$\rho c_{p,60} \approx 1.87 \times 10^6 \text{ J/(m}^3 \cdot \text{K)}, \quad \rho c_{p,50} \approx 1.46 \times 10^6 \text{ J/(m}^3 \cdot \text{K)}, \quad (5.8)$$

con uno scarto di circa il 28%. Ne consegue che, a parità di volume, la Paraffina 60 è caratterizzata da una maggiore inerzia termica e da un maggiore capacità

di accumulo sia sensibile sia latente. L'analisi può essere interpretata tramite il numero di Stefan,

$$Ste = \frac{c_p (T_{hot} - T_m)}{\lambda}, \quad (5.9)$$

che rappresenta il rapporto tra calore sensibile disponibile e calore latente necessario alla fusione. La paraffina 50, come già detto, presenta un calore specifico minore, ma anche un calore latente inferiore e, a parità di temperatura del fluido caldo T_{hot} , la sua minore temperatura di fusione comporta anche un valore più elevato di $(T_{hot} - T_m)$. Assumendo i valori di T_{hot} delle simulazioni, si ottiene un numero di Stefan dell'ordine di $Ste_{50} \approx 0.22-0.33$ e $Ste_{60} \approx 0.14-0.25$. Il numero di Stefan risulta quindi significativamente più elevato per la Paraffina 50 e ciò indica che, per tale materiale il contributo del calore sensibile disponibile rispetto all'energia latente richiesta per la fusione è maggiore.

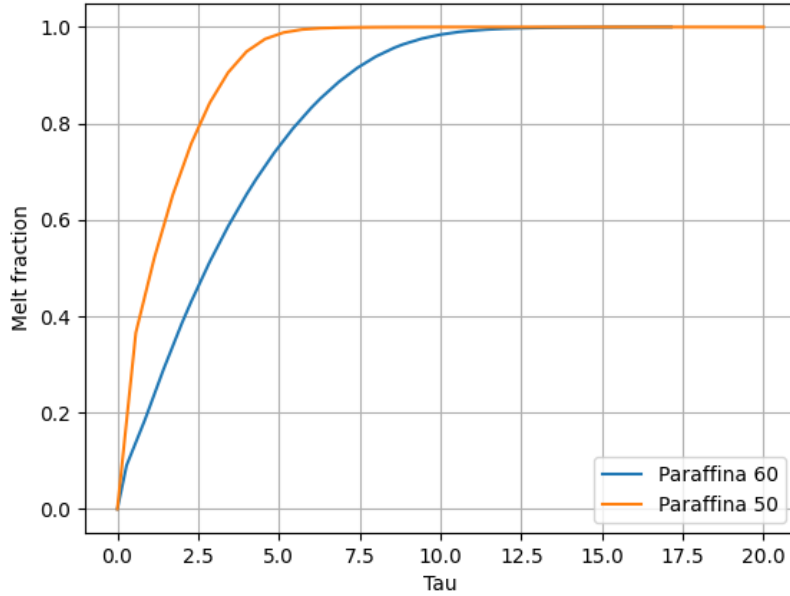


Figura 5.4: Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra i due materiali (Simulazione 1 e 2)

Il grafico dell'evoluzione della frazione liquida in funzione del tempo adimensionale $\tau = t/t_{res}$ (Figura 5.25) conferma tale comportamento: la Paraffina 50 raggiunge la completa fusione a valori di τ inferiori, mentre la Paraffina 60 mostra una crescita più graduale e un tempo di completamento maggiore. In particolare $\tau_{50} \approx 6$ mentre $\tau_{60} \approx 12$, ovvero circa il doppio. Nel confronto va però tenuto conto della diversa capacità di accumulo energetico dei due materiali: la Paraffina 60

possiede infatti un calore specifico e soprattutto un calore latente più elevati, che le consentono di immagazzinare una quantità di energia superiore: $Q_{60} \approx 3 \times 10^4 J$ mentre $Q_{50} \approx 2.5 \times 10^4 J$.

Confrontando i contour plot si nota che nel caso della paraffina 50 ci sono temperature più alte e maggiori gradienti di temperatura e ciò è confermato dai grafici della temperatura media e della varianza della temperatura.

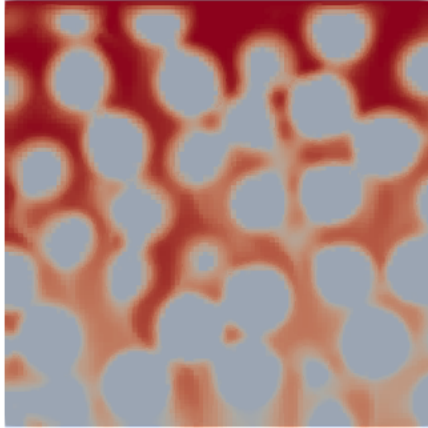


Figura 5.5: Contour plot di temperatura nel caso della paraffina 60 (Simulazione 1)

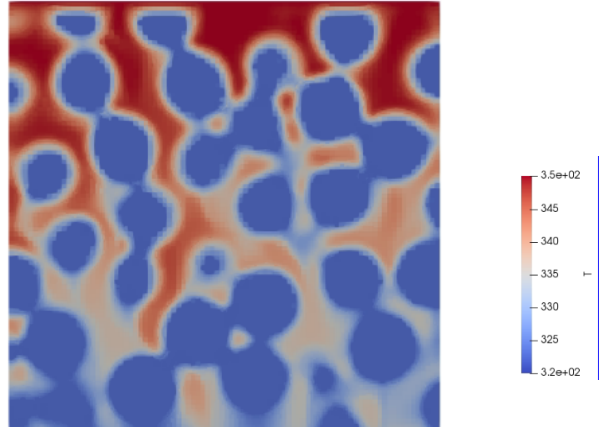


Figura 5.6: Contour plot di temperatura nel caso della paraffina 50 (Simulazione 2)

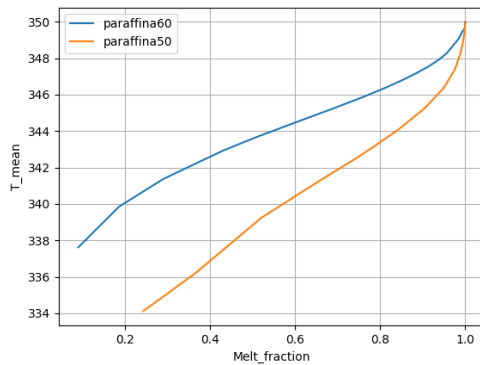


Figura 5.7: Confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 1 e 2).

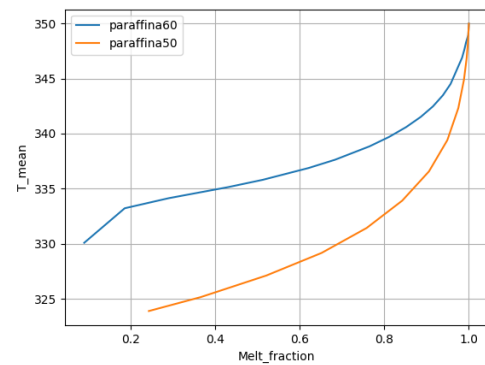


Figura 5.8: confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 1 e 2).

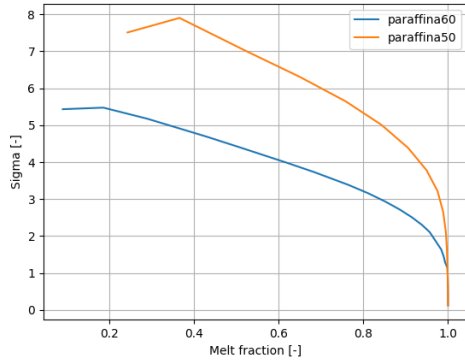


Figura 5.9: confronto tra le varianze della temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 1 e 2).

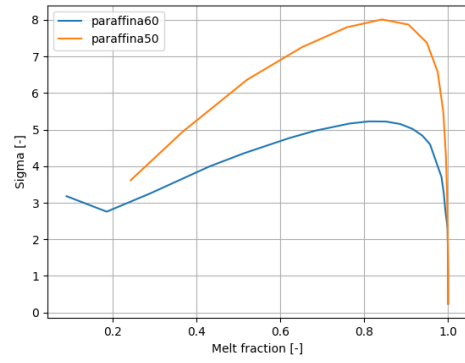


Figura 5.10: confronto tra le varianze della temperatura nel PCM in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 1 e 2).

Le medesime tendenze si osservano anche nelle altre geometrie analizzate. In particolare si riportano, a titolo esemplificativo, le stesse tipologie di mappe e di curve temporali per le capsule ellissoidali.

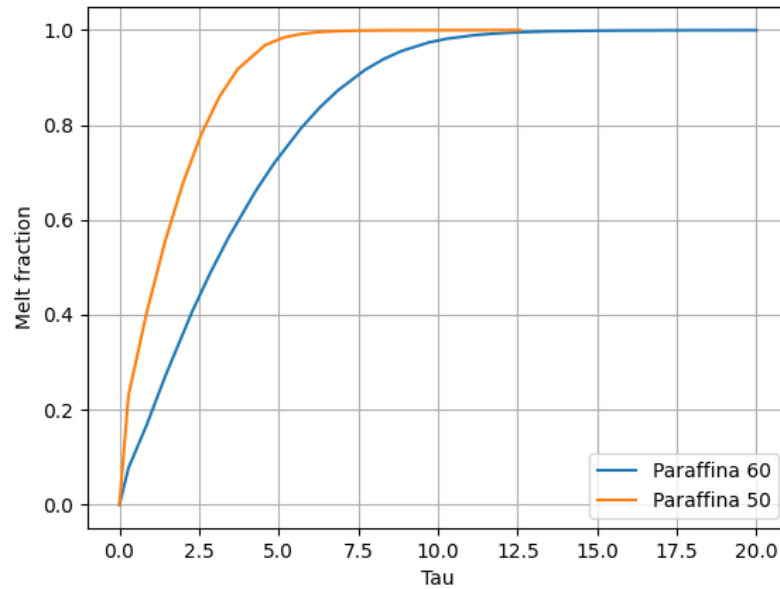


Figura 5.11: Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra i due materiali (Simulazioni 4 e 8)

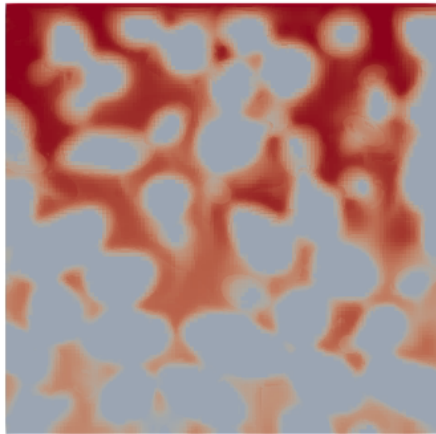


Figura 5.12: Contour plot di temperatura nel caso della paraffina 60 (Simulazione 4)

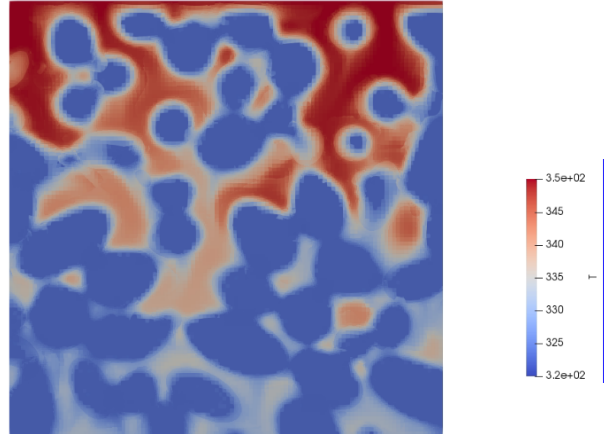


Figura 5.13: Contour plot di temperatura nel caso della paraffina 50 (Simulazione 8)

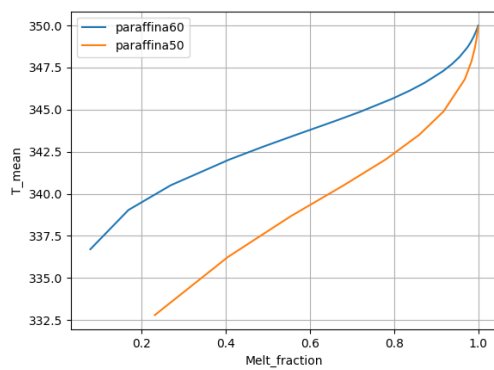


Figura 5.14: confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 4 e 8).

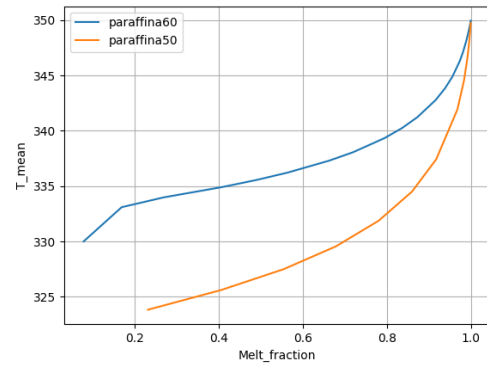
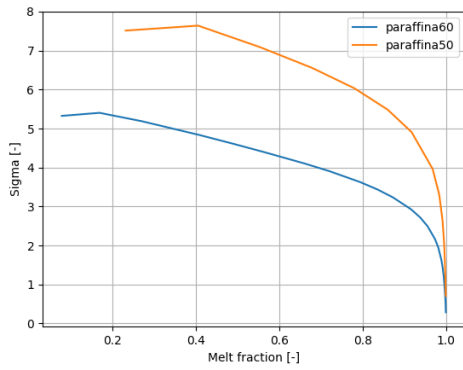
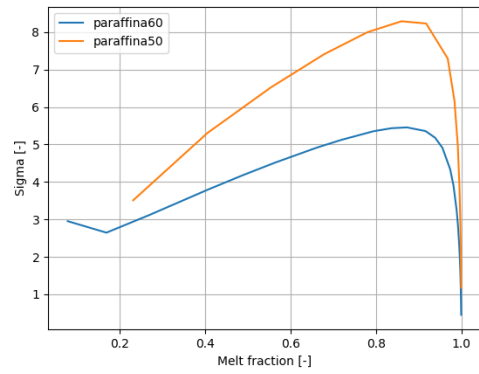


Figura 5.15: confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazione 4 e 8).



confronto tra le varianze della temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 4 e 8).



confronto tra le varianze della temperatura nel PCM in funzione di f_l tra i due materiali (Simulazioni 4 e 8).

5.3 Considerazioni sulla geometria

In questa sezione si confrontano le varie configurazioni geometriche simulate. Dal confronto tra le curve di frazione liquida in funzione del tempo in Figura 5.16 si osserva un comportamento complessivamente molto simile tra le diverse geometrie analizzate. I tempi di carica risultano quasi sovrapponibili per sfere da 1 cm, sfere da 2 cm ed ellissoidi. L'unica configurazione che evidenzia un leggero rallentamento è quella bimodale, la cui curva di frazione liquida risulta sovrapponibile con le altre configurazioni fino a metà del processo di fusione e a partire da f_l circa pari a 0.5 inizia a crescere in modo più graduale raggiungendo l'unità a tempi leggermente superiori. Anche per quanto riguarda i contour plot della temperatura si possono osservare profili molto simili tra le varie configurazioni. Le temperature medie si discostano leggermente e nel caso delle sfere bimodali si può notare nel grafico in Figura 5.24 una maggiore disuniformità nella temperatura del PCM; mentre per quanto riguarda l'HTF in figura 5.23 la configurazione delle sfere bimodali risulta essere quella più omogenea e quella delle ellissoidi la meno uniforme.

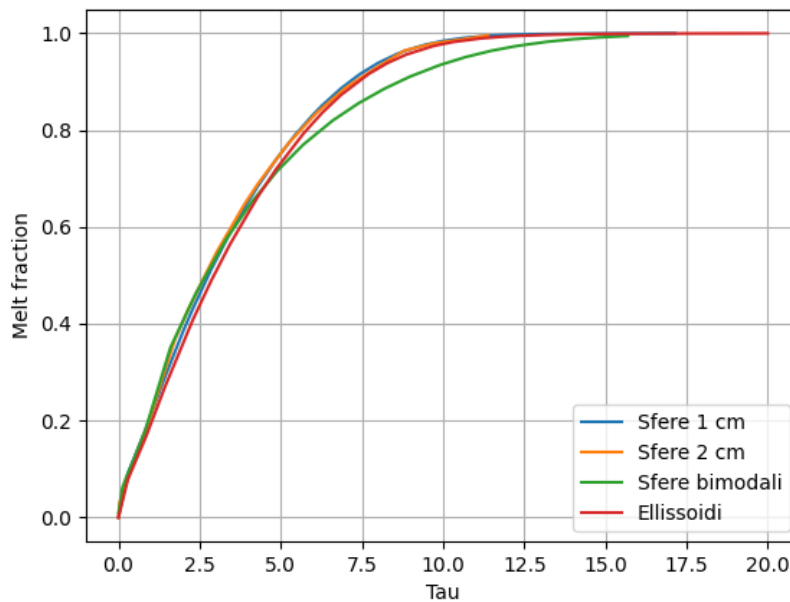


Figura 5.16: Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4, 6)

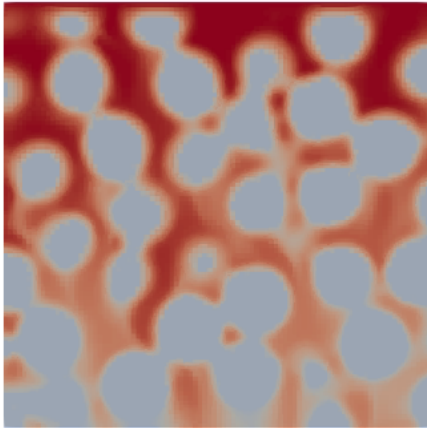


Figura 5.17: Contour plot di temperatura nel caso delle sfere di diametro 1 cm (Simulazione 1)

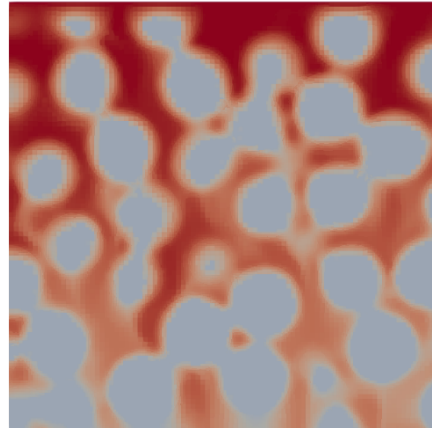


Figura 5.18: Contour plot di temperatura nel caso delle sfere di diametro 2 cm (Simulazione 6)

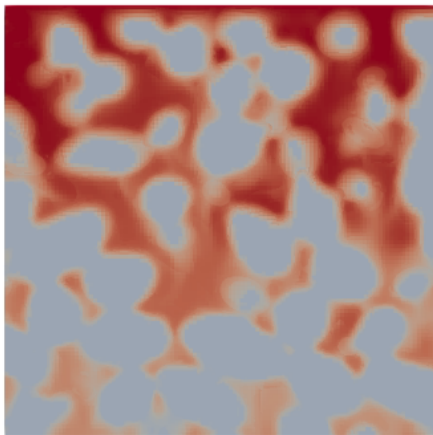
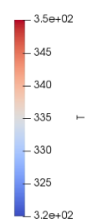


Figura 5.19: Contour plot di temperatura nel caso delle ellisoidi (Simulazione 4)

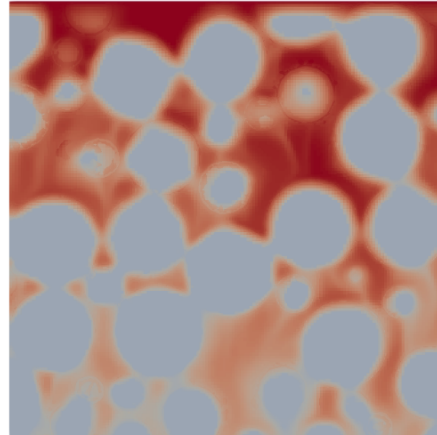
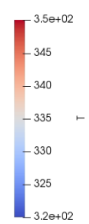


Figura 5.20: Contour plot di temperatura nel caso delle sfere bimodali (Simulazione 3)



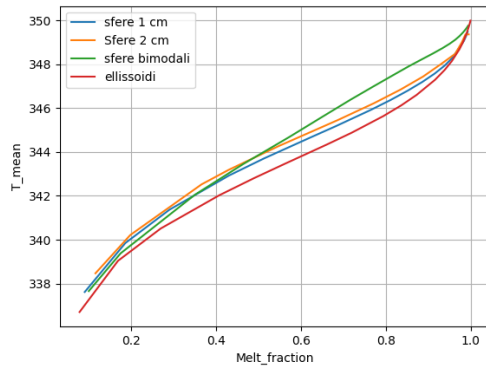


Figura 5.21: confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4 e 6).

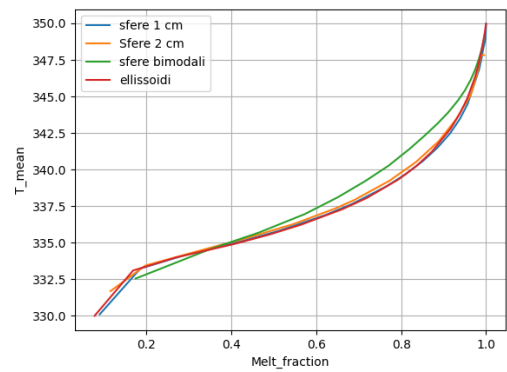


Figura 5.22: confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4 e 6).

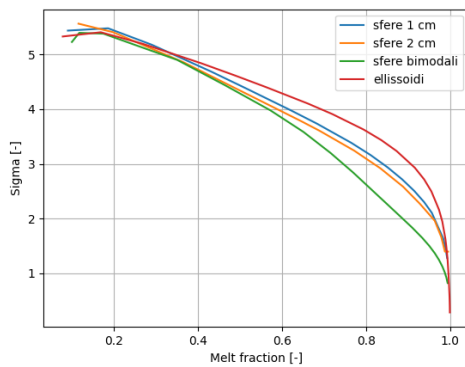


Figura 5.23: confronto tra le varianze della temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4 e 6).

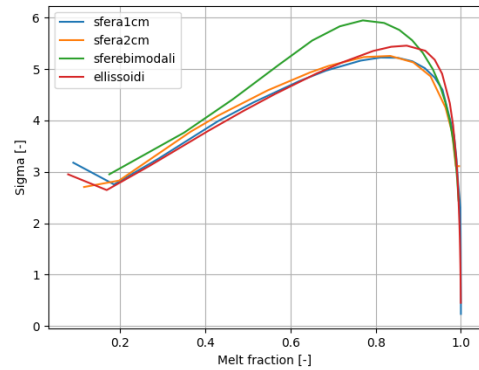


Figura 5.24: confronto tra le varianze della temperatura nel PCM in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 1, 3, 4 e 6).

Le medesime considerazioni possono essere fatte anche nel caso della paraffina 50 e vengono di seguito riportati gli stessi grafici per le simulazioni delle diverse configurazioni geometriche anche per questo PCM.

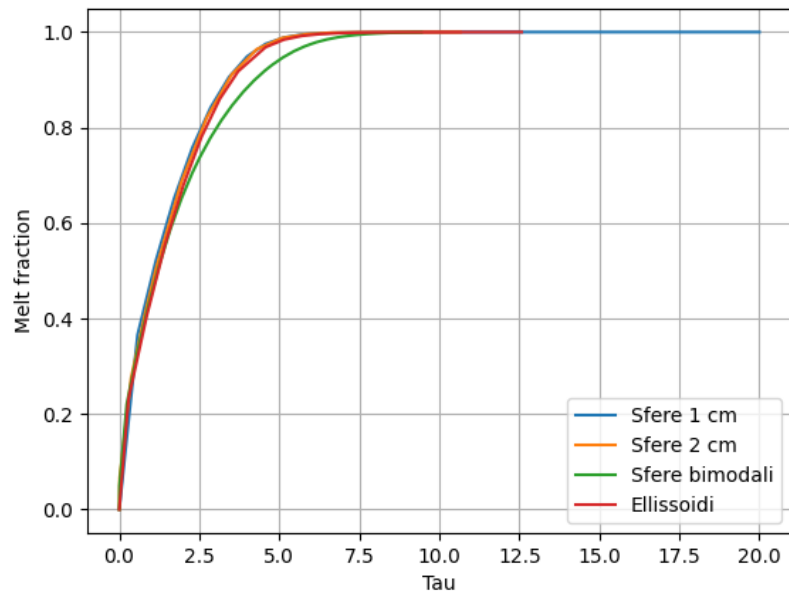


Figura 5.25: Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8, 5)

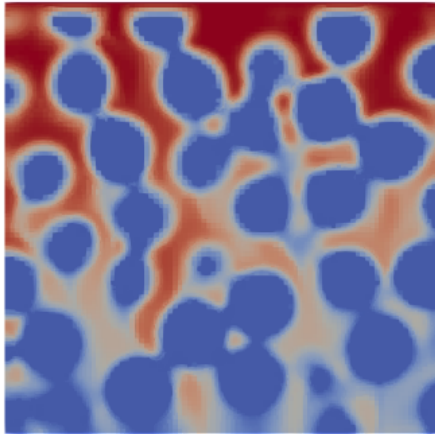


Figura 5.26: Contour plot di temperatura nel caso delle sfere di diametro 1 cm (Simulazione 2)

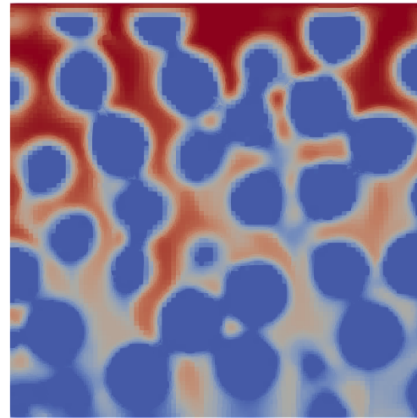


Figura 5.27: Contour plot di temperatura nel caso delle sfere di diametro 2 cm (Simulazione 5)

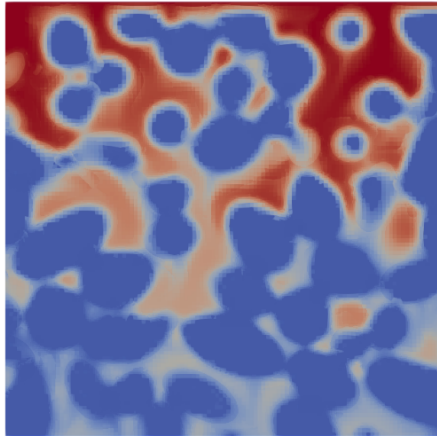
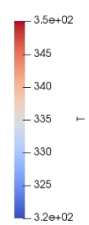


Figura 5.28: Contour plot di temperatura nel caso delle ellisoidi (Simulazione 8)

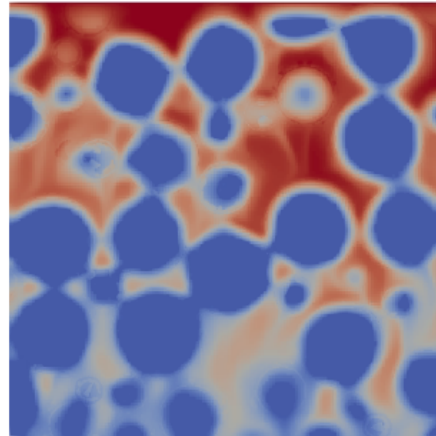
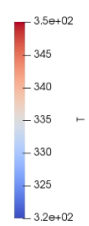


Figura 5.29: Contour plot di temperatura nel caso delle sfere bimodali (Simulazione 7)



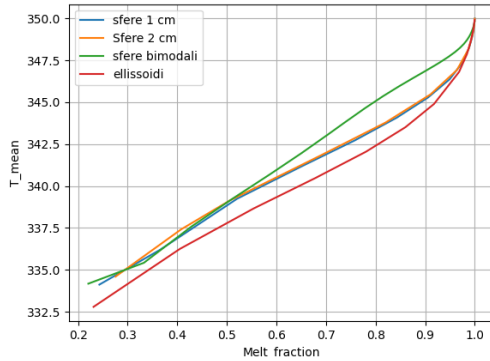


Figura 5.30: confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8 e 5).

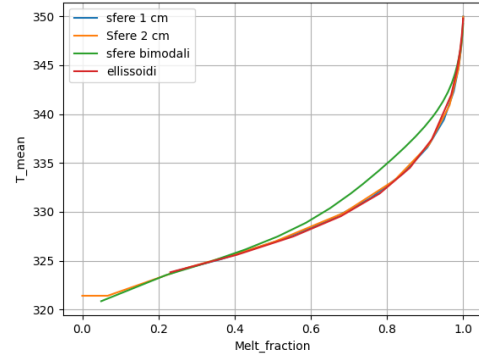


Figura 5.31: confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8 e 5).

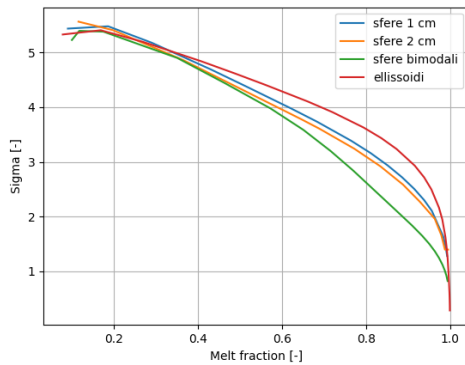


Figura 5.32: confronto tra le varianze di temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8 e 5).

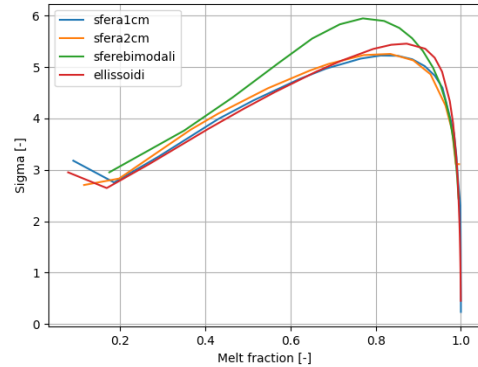


Figura 5.33: confronto tra le varianze di temperatura nel PCM in funzione di f_l tra le quattro geometrie (Simulazioni 2, 7, 8 e 5).

5.4 Considerazioni sulla temperatura HTF

In questa sezione si confrontano le prestazioni del sistema al variare della temperatura di ingresso del fluido termovettore (HTF), mantenendo invariate la geometria e tutte le altre condizioni operative. In particolare vengono analizzati due casi caratterizzati da temperature di ingresso pari a $T_{in,1} = 363$ K e $T_{in,2} = 350$ K. La differenza tra le due condizioni è quindi pari a circa 13 K, valore che modifica

direttamente il salto termico tra il fluido caldo e il materiale a cambiamento di fase (PCM). L'aumento della temperatura del fluido comporta infatti un incremento del gradiente termico tra l'HTF e il materiale e quindi un aumento del flusso di calore trasferito al PCM. Tale effetto può essere interpretato anche attraverso il numero di Stefan: poiché le proprietà termofisiche del PCM rimangono invariate nei due casi, la variazione del numero di Stefan è dovuta alla differenza tra la temperatura di ingresso del fluido e la temperatura di fusione del materiale. Nel caso con temperatura di ingresso più elevata risulta maggiore anche il numero di Stefan, in particolare nel caso di $T=350$ K si ottiene un numero di Stefan dell'ordine di $Ste_{350} \approx 0.14$ mentre per $T=363$ K si ottiene $Ste_{363} \approx 0.24$. Ciò indica che il contributo del calore sensibile disponibile rispetto all'energia latente richiesta per la fusione è maggiore, favorendo quindi una fusione più rapida del materiale. In Figura 5.34 è mostrato il confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l in funzione del tempo adimensionale τ per le due condizioni operative considerate. Dal grafico si osserva chiaramente che il caso con $T_{in} = 363$ K raggiunge la completa fusione del materiale in circa la metà del tempo rispetto al caso con $T_{in} = 350$ K. La differenza osservata nei tempi di carica si riflette direttamente nella velocità di accumulo energetico del sistema in quanto l'energia totale accumulata non varia. In particolare, la velocità di carica nel caso con temperatura di ingresso più elevata risulta circa doppia rispetto a quella ottenuta nel caso con $T_{in} = 350$ K. Dal confronto dei contour plot si osserva che nel caso con temperatura di ingresso più elevata l'HTF si mantiene a temperature superiori e anche il PCM raggiunge temperature mediamente più alte durante tutto il processo di carica. D'altra parte, la distribuzione della temperatura sia nell'HTF che all'interno del PCM risulta meno uniforme. Nel complesso, l'aumento della temperatura di ingresso del fluido termovettore determina quindi una significativa riduzione del tempo di carica e un incremento della velocità di accumulo energetico, a fronte però di una minore uniformità del campo termico all'interno del materiale.

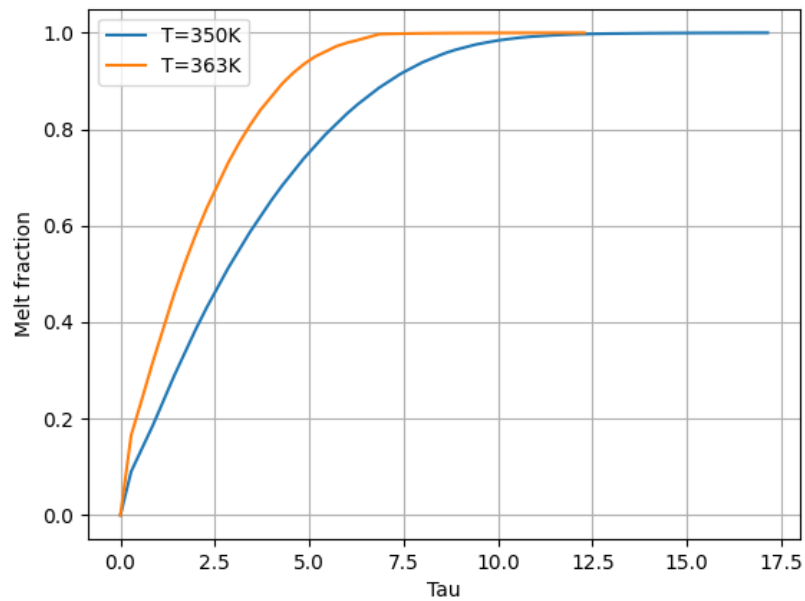


Figura 5.34: Confronto dell'evoluzione della frazione liquida f_l rispetto al tempo adimensionale τ tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11)

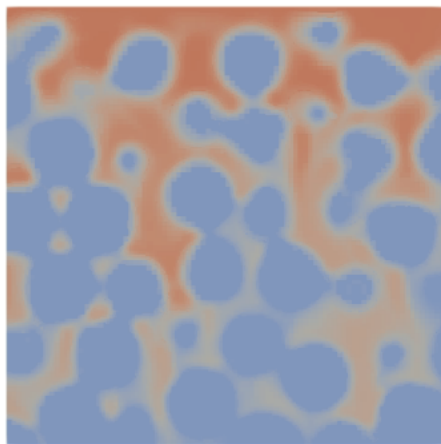


Figura 5.35: Contour plot di temperatura nel caso di temperatura in inlet pari a 350 K (Simulazione 1)

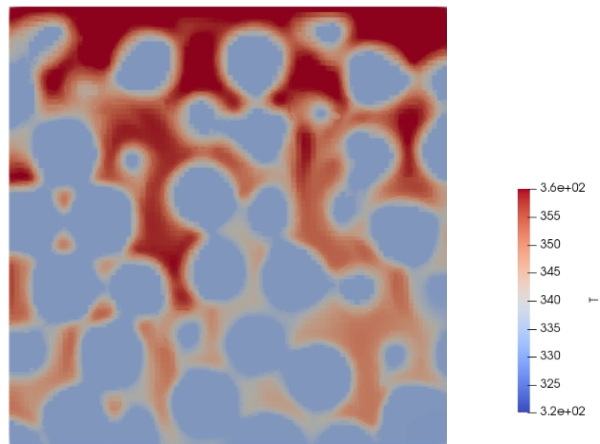


Figura 5.36: Contour plot di temperatura nel caso di temperatura in inlet pari a 363 K (Simulazione 11)

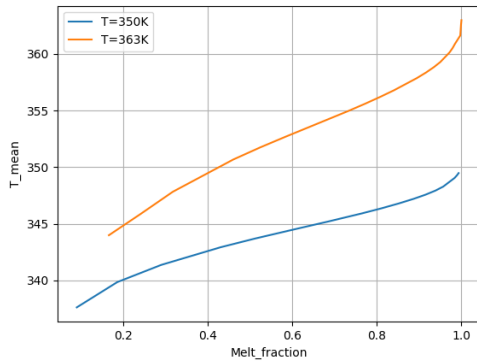


Figura 5.37: confronto tra le temperature medie nell'HTF in funzione di f_l tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11).

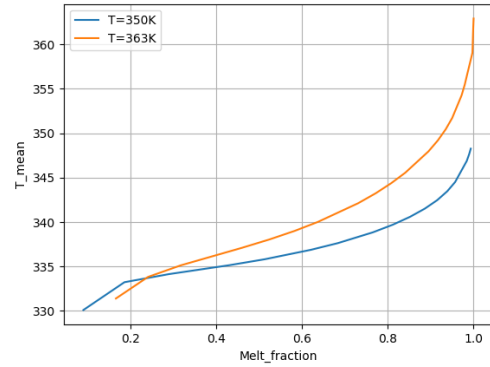


Figura 5.38: confronto tra le temperature medie nel PCM in funzione di f_l tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11).

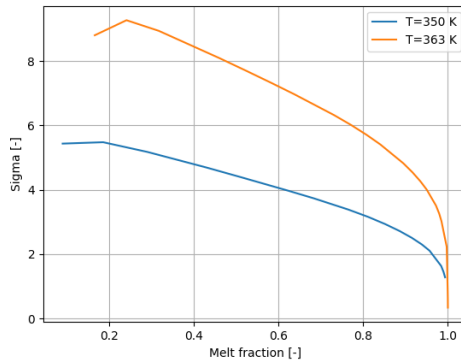


Figura 5.39: confronto tra le varianze di temperatura nell'HTF in funzione di f_l tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11).

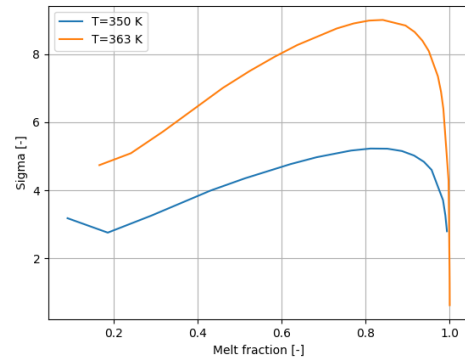


Figura 5.40: confronto tra le varianze di temperatura nel PCM in funzione di f_l tra le due temperature in inlet (Simulazioni 1 e 11).

5.5 Sintesi delle varie configurazioni

Si riportano nella Tabella 5.2 il tempo di carica e la velocità di carica ottenuti nelle diverse simulazioni. In particolare, la velocità di carica è stata normalizzata rispetto al volume di PCM contenuto nel REV di ciascuna simulazione. Nella Tabella 5.1 sono invece riportate le velocità di carica normalizzate sia rispetto al volume totale del sistema sia rispetto al volume di PCM. Come atteso, il rapporto tra

questi due valori corrisponde alla porosità dell'impaccamento. Poiché nelle diverse configurazioni la porosità varia solo in misura limitata, si è ritenuto sufficiente riportare nella Tabella 5.2 una sola delle due grandezze normalizzate.

N° simulazione	Paraffina	Capsula	Temperatura [K]	Velocità/Volume [W/m ³]	Velocità/Vol PCM [W/m ³]
1	60	sfere 1cm	350	4.65E+05	6.84E+05
2	50	sfere 1 cm	350	7.80E+05	1.15E+06
3	60	sfere bimodali	350	1.31E+05	1.98E+05
4	60	ellissoidi	350	4.58E+05	6.37E+05
5	50	sfere 2cm	350	1.90E+05	2.80E+05
6	60	sfere 2 cm	350	1.17E+05	1.72E+05
7	50	sfere bimodali	350	2.23E+05	3.37E+05
8	50	ellissoidi	350	7.51E+05	1.04E+06
9	60	sfere 2 cm	363	1.81E+05	2.66E+05
10	60	sfere bimodali	363	2.20E+05	3.34E+05
11	60	sfere 1 cm	363	8.09E+05	1.19E+06
12	50	sfere 1 cm	363	1.11E+06	1.64E+06
13	60	ellissoidi	363	7.04E+05	9.78E+05
14	50	sfere 2 cm	363	2.52E+05	3.70E+05
15	50	sfere bimodali	363	3.09E+05	4.68E+05
16	50	ellissoidi	363	1.18E+06	1.64E+06

Tabella 5.1: Velocità normalizzate

N° simulazione	Paraffina	Capsula	Temperatura [K]	tempo di carica [s]	τ di carica	Velocità di carica [W]	Velocità/Vol PCM [W/m ³]
1	60	sfere 1cm	350	4.00E+02	1.14E+01	8.17E+01	6.84E+05
2	50	sfere 1 cm	350	2.00E+02	5.71E+00	1.37E+02	1.15E+06
3	60	sfere bimodali	350	1.38E+03	1.57E+01	1.02E+02	1.98E+05
4	60	ellissoidi	350	4.40E+02	1.26E+01	7.87E+01	6.37E+05
5	50	sfere 2cm	350	8.20E+02	5.86E+00	2.67E+02	2.80E+05
6	60	sfere 2 cm	350	1.6E+03	1.14E+01	1.64E+02	1.72E+05
7	50	sfere bimodali	350	6.80E+02	7.73E+00	1.73E+02	3.37E+05
8	50	ellissoidi	350	2.20E+02	6.29E+00	1.32E+02	1.04E+06
9	60	sfere 2 cm	363	1.03E+03	7.36E+00	2.54E+02	2.66E+05
10	60	sfere bimodali	363	8.20E+02	2.34E+01	1.72E+02	3.34E+05
11	60	sfere 1 cm	363	2.30E+02	6.57E+00	1.42E+02	1.19E+06
12	50	sfere 1 cm	363	1.40E+02	4.00E+00	1.96E+02	1.64E+06
13	60	ellissoidi	363	2.80E+02	8.00E+00	1.24E+02	9.78E+05
14	50	sfere 2 cm	363	6.20E+02	4.43E+00	3.54E+02	3.70E+05
15	50	sfere bimodali	363	4.90E+02	3.50E+00	2.41E+02	4.68E+05
16	50	ellissoidi	363	1.40E+02	4.00E+00	2.07E+02	1.64E+06

Tabella 5.2: Risultati delle simulazioni

Conclusioni

Questo lavoro di tesi ha avuto come oggetto l'analisi del comportamento termico e fluidodinamico di sistemi di accumulo di energia termica a calore latente a letto impaccato, il cui funzionamento è governato da fenomeni fisici complessi in cui interagiscono trasporto convettivo nel fluido termovettore, conduzione nel materiale a cambiamento di fase e processo di fusione. L'obiettivo principale del lavoro è stato dunque quello di sviluppare un approccio di simulazione in grado di descrivere in modo dettagliato tali fenomeni, utilizzando strumenti di fluidodinamica computazionale. A questo scopo è stato costruito un ambiente di simulazione basato sul software open-source OpenFOAM, all'interno del quale sono state definite le diverse fasi del workflow numerico: generazione delle geometrie rappresentative del letto impaccato, costruzione della mesh, impostazione delle condizioni operative e configurazione dei solver per la risoluzione dei fenomeni termofluidodinamici. Il lavoro ha portato alla definizione di una procedura di simulazione applicabile allo studio di sistemi di accumulo termico a letto impaccato a scala di volume elementare rappresentativo (REV). All'interno di questo quadro sono state analizzate diverse configurazioni geometriche dell'impaccamento, considerando sfere monodisperse, impaccamenti bimodali ed elementi di forma ellissoidale, insieme a differenti proprietà dei materiali a cambiamento di fase e temperature del fluido termovettore. Questa analisi ha permesso di osservare come la geometria delle capsule, le proprietà termofisiche del PCM e le condizioni operative influenzino il processo di trasferimento di calore e la dinamica di fusione del materiale. Più in generale, il lavoro ha permesso di mettere a punto un insieme di strumenti e metodologie per l'analisi CFD di sistemi PBLHTES sviluppando sia il solver PCMFoam che strumenti di pre-processing e post-processing. Il principale risultato infatti, oltre ai singoli risultati numerici ottenuti, risiede nella definizione di un framework di simulazione che può costituire un supporto utile sia nella fase di progettazione del sistema sia nella valutazione dell'impatto di diverse scelte progettuali e operative. Le attività svolte aprono inoltre diverse possibili linee di sviluppo. Un primo ambito riguarda il miglioramento e il potenziamento del solver utilizzato nelle simulazioni, con l'obiettivo di descrivere in modo più accurato i fenomeni legati al cambiamento di fase e di rendere più efficiente la risoluzione numerica del problema.

Un ulteriore sviluppo consiste nell'estendere l'analisi anche alla fase di scarica del sistema. Nel presente lavoro l'attenzione è stata concentrata principalmente sulla fase di carica, ma lo studio della scarica risulta altrettanto rilevante per una valutazione completa delle prestazioni del sistema. La metodologia sviluppata potrebbe inoltre essere utilizzata per affrontare configurazioni fisiche più complesse rispetto a quelle considerate in questo lavoro. In particolare, nelle simulazioni presentate l'attenzione è stata rivolta principalmente al comportamento del materiale a cambiamento di fase, mentre la presenza della capsula che lo contiene è stata trascurata. In studi futuri sarebbe quindi possibile includere esplicitamente anche la parete della capsula e valutarne l'influenza sui fenomeni di trasferimento di calore. Questo aspetto è particolarmente rilevante considerando che uno dei principali limiti dei PCM è la loro bassa conducibilità termica, che può ridurre l'efficienza del processo di carica e scarica. L'ambiente di simulazione sviluppato in questo lavoro potrebbe quindi essere utilizzato per analizzare diverse strategie volte a migliorare il trasferimento di calore all'interno delle capsule, come ad esempio l'inserimento di strutture ad alta conducibilità termica, griglie o reticoli metallici, oppure altre soluzioni di potenziamento dello scambio termico. In questo contesto, le simulazioni CFD possono rappresentare uno strumento utile per valutare preliminarmente l'efficacia di diverse soluzioni progettuali prima della loro realizzazione sperimentale. Ciò permetterebbe di esplorare un numero maggiore di configurazioni possibili e di indirizzare in modo più mirato le attività sperimentali verso le soluzioni più promettenti. In prospettiva, gli strumenti e la metodologia sviluppati in questo lavoro potrebbero essere utilizzati come base per una campagna di simulazioni più ampia. In particolare, sarebbe possibile esplorare in modo più sistematico l'influenza di diversi parametri con l'obiettivo di individuare configurazioni più efficienti per specifiche applicazioni. Infine, un possibile sviluppo riguarda l'integrazione tra simulazioni CFD e tecniche di machine learning. I risultati ottenuti tramite simulazioni potrebbero infatti essere utilizzati per addestrare modelli in grado di prevedere rapidamente il comportamento del sistema al variare dei parametri di progetto. Questo approccio potrebbe consentire di ampliare lo spazio dei parametri esplorabili e di supportare in modo più efficiente le attività di ottimizzazione del design. In sintesi, il lavoro svolto ha permesso di definire una metodologia di simulazione per lo studio CFD di sistemi di accumulo termico a letto impaccato con materiali a cambiamento di fase, fornendo una base di strumenti numerici utilizzabile per analisi e sviluppi futuri.

Appendice

Si riporta di seguito il codice principale del solver implementato per la risoluzione del problema termico.

```
1 /*-----*\
2  ===== /
3  \\      / F i e l d      / OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \\      / O p e r a t i o n      /
5  \\      / A n d      / Copyright (C) The OpenFOAM Foundation, Ltd.
6  \\ /      M a n i p u l a t i o n      /
7  -----
8
9  Modifications and additional contributions:
10
11  MultiForm Group, University of Nottingham
12  Copyright (C) Matteo Icardi and collaborators
13  Contributions to this file are licensed under the same
14  GPLv3 terms as OpenFOAM.
15
16  This work is based on OpenFOAM, with substantial portions copied,
17  modified, or extended under the GNU General Public License (GPLv3).
18  Please refer to the original OpenFOAM copyright notice for the
19  base framework,
20  and to MultiForm Group for new additions or modifications.
21  For the full terms of
22  this license, see <http://www.gnu.org/licenses/>.
23
24  Description
25  Solves the transient energy transport equation for
26  phase change material (PCM)
27
28  Developers:
29  Diego Fida, 2025
30
31 /*-----*/
```

```

32
33 #include "fvCFD.H"
34 #include "pimpleControl.H"
35 #include "reverseLinear.H"
36
37 using namespace Foam;
38
39 // * * * * *
40
41 int main(int argc, char *argv[])
42 {
43     #include "postProcess.H"
44     #include "setRootCaseLists.H"
45     #include "createTime.H"
46     #include "createMesh.H"
47
48     pimpleControl pimple(mesh);
49
50     #include "createFields.H"
51
52     // * * * * *
53
54     #include "CourantNo.H"
55
56     Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;
57     while (pimple.loop(runTime))
58     // Pimple loop
59     {
60         Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
61
62         while (pimple.loop())
63         {
64
65             // Update effective properties based on current
66             Temperature and liquid fraction
67             kPCM=((1.0 - LbyTot)*kPCMsolid + LbyTot*kPCMliquid);
68             k=1.0 / reverseLinear<scalar>(mesh). interpolate
69             (((1.0 - flagPCM)/kf + flagPCM/kPCM));
70
71             CpPCM=((1.0 - LbyTot)*CpPCMsolid + LbyTot*CpPCMliquid);
72             Cp= ((1.0 - flagPCM)*Cpf + flagPCM*CpPCM);
73
74             meltingCells=flagPCM*(pos(LbyTot)*pos(Tm-T)+
75             +pos(1-LbyTot)*pos(T-Tm))*pos(LbyTot+small)*
76             *pos(1-LbyTot+small);

```

```
77
78
79     while (pimple.correctNonOrthogonal())
80     {
81         fvScalarMatrix LbyTotEqn
82         (
83             fvm::ddt(LbyTot)
84             ==
85             (fvc::laplacian(k, T)
86              - fvc::div(fvc::interpolate(rho*Cp)*phi, T,
87                        "div(phi,T)"))
88             /(rho*LPCM)*meltingCells
89         );
90         LbyTotEqn.relax();
91         LbyTotEqn.solve();
92
93
94         fvScalarMatrix TEqn
95         (
96             fvm::ddt(rho*Cp, T)
97             + fvm::div(fvc::interpolate(rho*Cp)*phi, T,
98                       "div(phi,T)"))
99             +rho*LPCM*meltingCells*fvc::ddt(LbyTot)
100            - fvm::laplacian(k, T)
101         );
102         TEqn.relax();
103         TEqn.solve();
104     }
105
106     }
107
108     runTime.write();
109 }
110
111 Info<< "End\n" << endl;
112 Info<< "ExecutionTime = "<< runTime.elapsedCpuTime() << " s" << endl;
113 return 0;
114 }
115
116
117 // *****
```

Bibliografia

- [1] IRENA. *Electricity storage and renewables: Costs and markets to 2030*. Rapp. tecn. Abu Dhabi: IRENA, International Renewable Energy Agency, 2017. URL: https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Publication/2017/Oct/IRENA_Electricity_Storage_Costs_2017.pdf (cit. a p. 1).
- [2] IRENA. *Renewable Capacity Highlights*. Rapp. tecn. Masdar City: IRENA, International Renewable Energy Agency, 2025. URL: https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Publication/2025/Mar/IRENA_DAT_RE_Capacity_Highlights_2025.pdf (cit. a p. 1).
- [3] Ember. *Global Electricity Review 2025*. Rapp. tecn. London: Ember, 2025. URL: https://ember-energy.org/app/uploads/2025/01/EER_2025_22012025.pdf (cit. a p. 1).
- [4] IEA. *Renewables 2025: Analysis and forecasts to 2030*. Rapp. tecn. Paris: International Energy Agency (IEA), 2025. URL: <https://iea.blob.core.windows.net/assets/76ad6eac-2aa6-4c55-9a55-b8dc0dba9f9e/Renewables2025.pdf> (cit. a p. 1).
- [5] Cédric Clastres Maurice K. Ekoue Matt Woerman. «Intermittency and uncertainty in wind and solar energy: Impacts on the French electricity market». In: *Energy Economics* 142 (2025), p. 108176. DOI: 10.1016/j.eneco.2024.108176 (cit. a p. 1).
- [6] Edward Wheatcroft, Henry Wynn, Kristina Lygnerud, Giorgio Bonvicini e Daniela Leonte. «The Role of Low Temperature Waste Heat Recovery in Achieving 2050 Goals: A Policy Positioning Paper». In: *Energies* 13.8 (2020), p. 2107. DOI: 10.3390/en13082107 (cit. a p. 1).
- [7] A. Felix Regin, S. C. Solanki e J. S. Saini. «Heat transfer characteristics of thermal energy storage system using PCM capsules: A review». In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 12 (2008), pp. 2438–2458. DOI: 10.1016/j.rser.2007.06.009 (cit. alle pp. 2, 4).

-
- [8] Gang Li. «Sensible heat thermal storage energy and exergy performance evaluations». In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 53 (2016), pp. 897–923. DOI: 10.1016/j.rser.2015.09.006 (cit. a p. 3).
- [9] M. Abdullah, M. Koushaeian, N. A. Shah e J. D. Chung. «A review on thermochemical seasonal solar energy storage materials and modeling methods». In: *International Journal of Air-Conditioning and Refrigeration* 32.1 (2024). DOI: 10.1007/s44189-023-00044-6 (cit. a p. 4).
- [10] I. Sarbu e C. Sebarchievici. «A Comprehensive Review of Thermal Energy Storage». In: *Sustainability* 10.1 (2018), p. 191. DOI: 10.3390/su10010191 (cit. alle pp. 5, 11).
- [11] Gökhan Hekimoğlu e Ali Sari. «A review on phase change materials (PCMs) for thermal energy storage implementations». In: *Materials Today: Proceedings* 58 (2022), pp. 1360–1367. DOI: 10.1016/j.matpr.2022.02.231 (cit. a p. 5).
- [12] A. Sharma, V.V. Tyagi, C.R. Chen e D. Buddhi. «Developments in organic solid–liquid phase change materials and their heat transfer characteristics for thermal energy storage». In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 51 (2015), pp. 814–829. DOI: 10.1016/j.rser.2015.07.090 (cit. alle pp. 5, 6, 9, 10).
- [13] L. F. Cabeza, A. Castell, C. Barreneche, A. de Gracia e A. I. Fernández. «Materials used as PCM in thermal energy storage in buildings: A review». In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 15.3 (2011), pp. 1675–1695. DOI: 10.1016/j.rser.2010.11.018 (cit. a p. 9).
- [14] B. Zalba, J. M. Marín, L. F. Cabeza e H. Mehling. «Review on thermal energy storage with phase change: materials, heat transfer analysis and applications». In: *Applied Thermal Engineering* 23.3 (2003), pp. 251–283. DOI: 10.1016/S1359-4311(02)00192-8 (cit. alle pp. 10, 11).
- [15] Z. N. Meng e P. Zhang. «Experimental and numerical investigation of a tube-in-tank latent thermal energy storage unit using composite PCM». In: *Applied Energy* 190 (2017), pp. 524–539. DOI: 10.1016/j.apenergy.2016.12.163 (cit. a p. 11).
- [16] Zhi Li Xiaoli Yu Kuang Hu. «Progress and prospects of packed-bed latent thermal energy storage: Fundamentals, materials, devices and applications». In: *Journal of Energy Storage* 131.117536 (2025). DOI: 10.1016/j.est.2025.117536 (cit. alle pp. 11–14, 16, 17).
- [17] Xiaojun Yu et al. «Evaluation of PCM thermophysical properties on a compressed air energy storage system integrated with packed-bed latent thermal energy storage». In: *Journal of Energy Storage* 81 (2024). DOI: 10.1016/j.est.2024.110519 (cit. a p. 13).

- [18] F. Ma e P. Zhang. «Investigation on the performance of a high-temperature packed bed latent heat thermal energy storage system using Al–Si alloy». In: *Energy Conversion and Management* 150 (2017). DOI: 10.1016/j.enconman.2017.08.040 (cit. a p. 13).
- [19] Katsunori Nagano, S. Takeda, T. Mochida e K. Shimakura. «Thermal characteristics of a direct heat exchange system between granules with phase change material and air». In: *Applied Thermal Engineering* 24.14–15 (2004), pp. 2131–2144. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2004.02.004. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1359431104000560> (cit. a p. 15).
- [20] Ferran Brosa Planella. «A simple model for latent thermal energy storage systems with encapsulated phase-change material». In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 239 (2025), p. 126533. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.126533. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931024013619?via%3Dihub> (cit. alle pp. 16–18).
- [21] F Moukalled L Mangani M Darwish. *The finite volume method in computational fluid dynamics*. 2016 (cit. a p. 22).
- [22] Joel H Ferziger, Milovan Perić e Robert L Street. *Computational methods for fluid dynamics*. springer, 2019 (cit. a p. 25).
- [23] Man Fan, Zhaoyang Luan, Hua Yang, Xuemei Zhang, Mingdong Hou, Leihong Guo e Xiangfei Kong. «Charging and discharging characteristics of cascaded latent heat storage (CLHS) tank for low-temperature applications». In: *Applied Thermal Engineering* 213 (ago. 2022), p. 118698 (cit. a p. 29).
- [24] Agnese Marcato, Gianluca Boccardo e Daniele L. Marchisio. «From Computational Fluid Dynamics to Structure Interpretation via Neural Networks: An Application to Flow and Transport in Porous Media». In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 61.24 (2022), pp. 8530–8541. DOI: 10.1021/acs.iecr.1c04760 (cit. alle pp. 33, 34).
- [25] Christopher Greenshields. *OpenFOAM v13 User Guide*. London, UK: The OpenFOAM Foundation, 2025. URL: <https://doc.cfd.direct/openfoam/user-guide-v13> (cit. a p. 37).
- [26] Jacob Bear. *Dynamics of fluids in porous media*. Courier Corporation, 2013 (cit. a p. 41).