

NANOMATERIALI PER L'ENERGIA DEL FUTURO

DAI MATERIALI AI PROCESSI PER LA CONVERSIONE DELL'ENERGIA: CHE RUOLO PER L'INTELLIGENZA ARTIFICIALE?

Ilenia Rossetti

Università degli Studi di Milano –Dip. Chimica

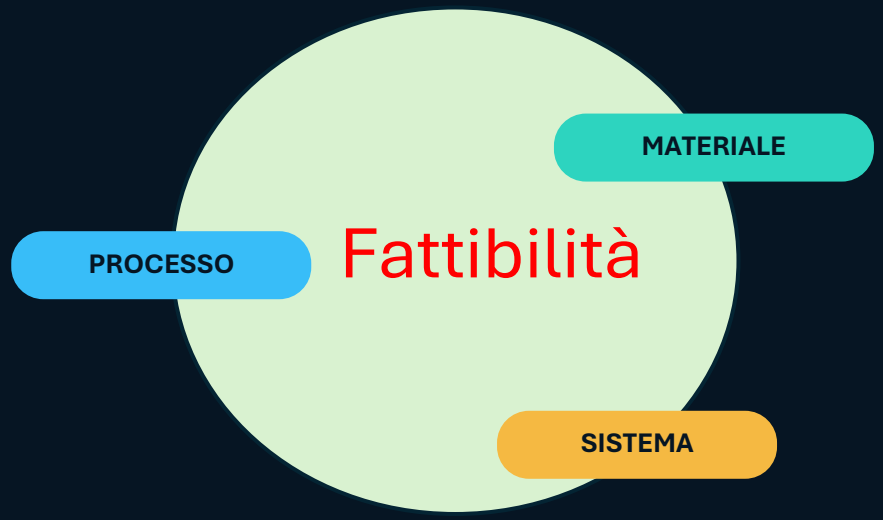
Energia, intelligenza artificiale, materiali · Università degli Studi di Perugia

Un materiale eccellente basta?

NO

La prestazione reale emerge dall’interazione tra materiale, condizioni operative e configurazione del processo.

Un record di capacità, attività o selettività su scala di laboratorio può scomparire quando entrano in gioco fattori di passaggio di scala: impurezze, durata reale, fenomeni di trasporto, energia di rigenerazione e costo.



Divario tra proprietà del materiale e prestazione nel processo

MISURA DI LABORATORIO

Capacità o attività

Selettività ideale

Prestazione inizial

Rigenerazione pos

DECISIONE DI PROCESSO

Produttività per unità di volume di

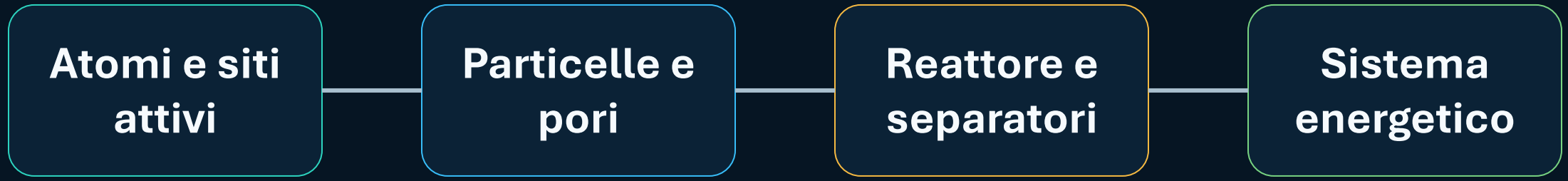
nella miscela reale

li o durata in

generazione



Quattro scale, una sola decisione



Struttura, composizione, difetti

Diffusione, cinetica, stabilità

Bilanci, scambi, cicli

Energia, costo, emissioni

L’approccio classico richiede tempo e di combinare diverse expertise (spesso con sensibilità diversa)

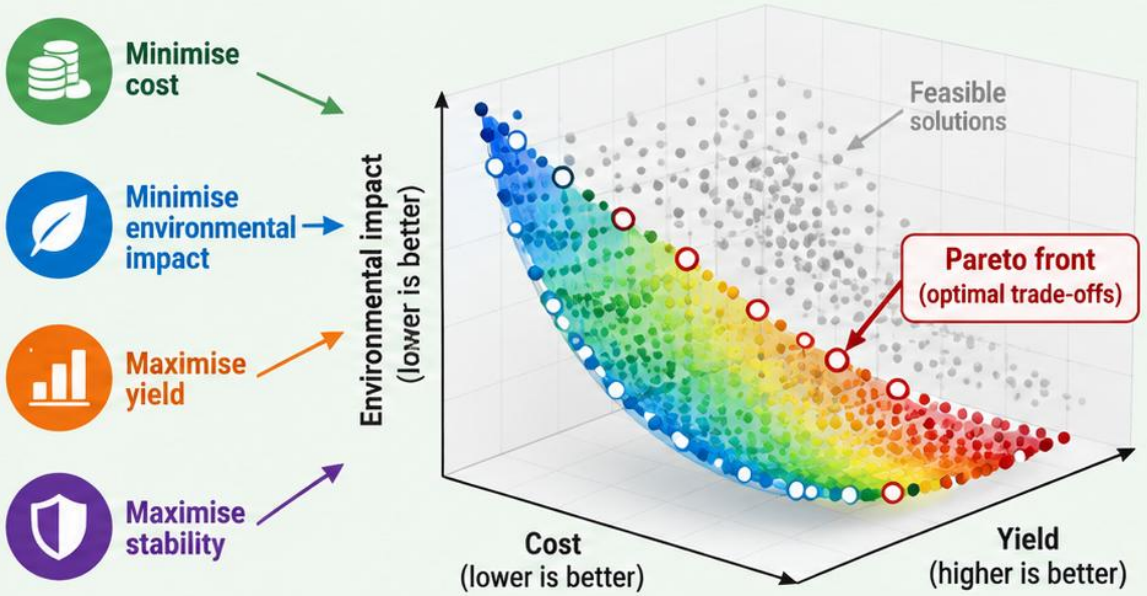
L’IA può attraversare le scale. La fisica stabilisce quali connessioni sono plausibili.

Quattro funzioni dell’IA: dove produce v

PREDIRE

Multiobjective optimisation

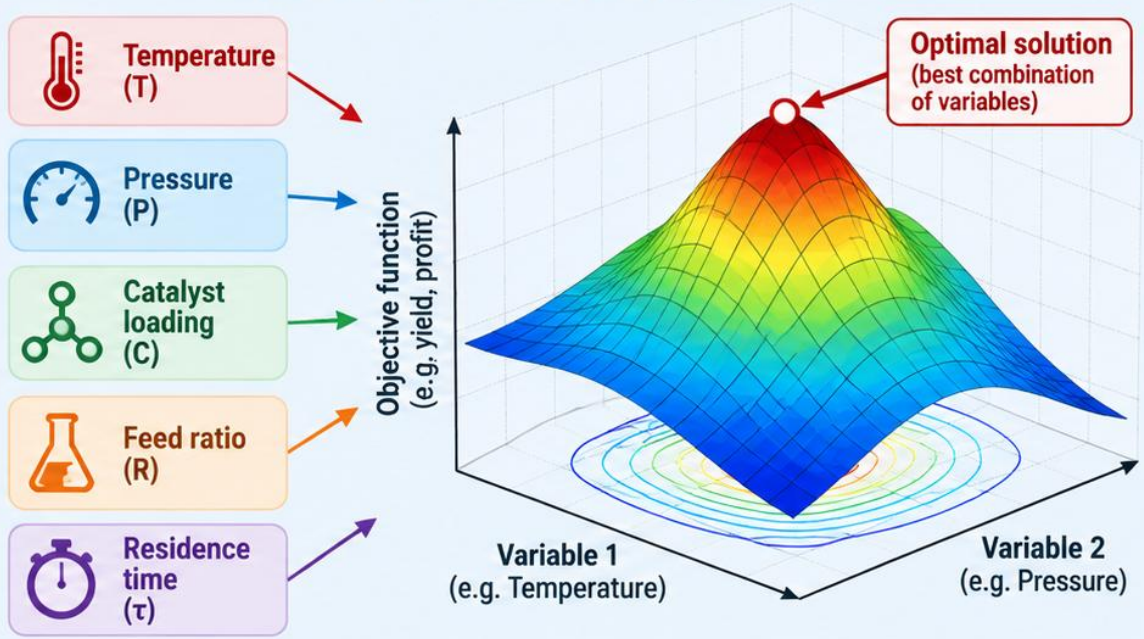
Find the best trade-off among conflicting objectives



Multiobjective optimisation identifies a set of optimal solutions (Pareto front) in which no objective can be improved without worsening at least one of the others.

Multivariable optimisation

Find the best combination of multiple decision variables



Multivariable optimisation searches the optimal values of several decision variables to maximise or minimise a given objective function.

processo

Il ciclo dati, modello ed esperimento



Il modello non elimina esperimenti. Sceglie quelli che riducono maggiormente l’incertezza.

L’IA non deve prescindere da una forma robusta di controllo decisionale (più semplice garantirlo a livello di materiali che di processo)

Esempio: H_2 storage mediante metanazione di CO_2

Bassa densità energetica di H_2 (volumetrica)

Problema per lo stoccaggio e il trasporto

→ **Necessità di diverse soluzioni di stoccaggio (vettori energetici)**

Carbon Capture & Utilisation: mancano soluzioni realizzative

Requisiti

- Utilizzo su larga scala
- Infrastrutture esistenti
- Normative già disponibili
- Costi «ragionevoli»

↓

CH_4

Esempio: H_2 storage mediante metanazione di CO_2

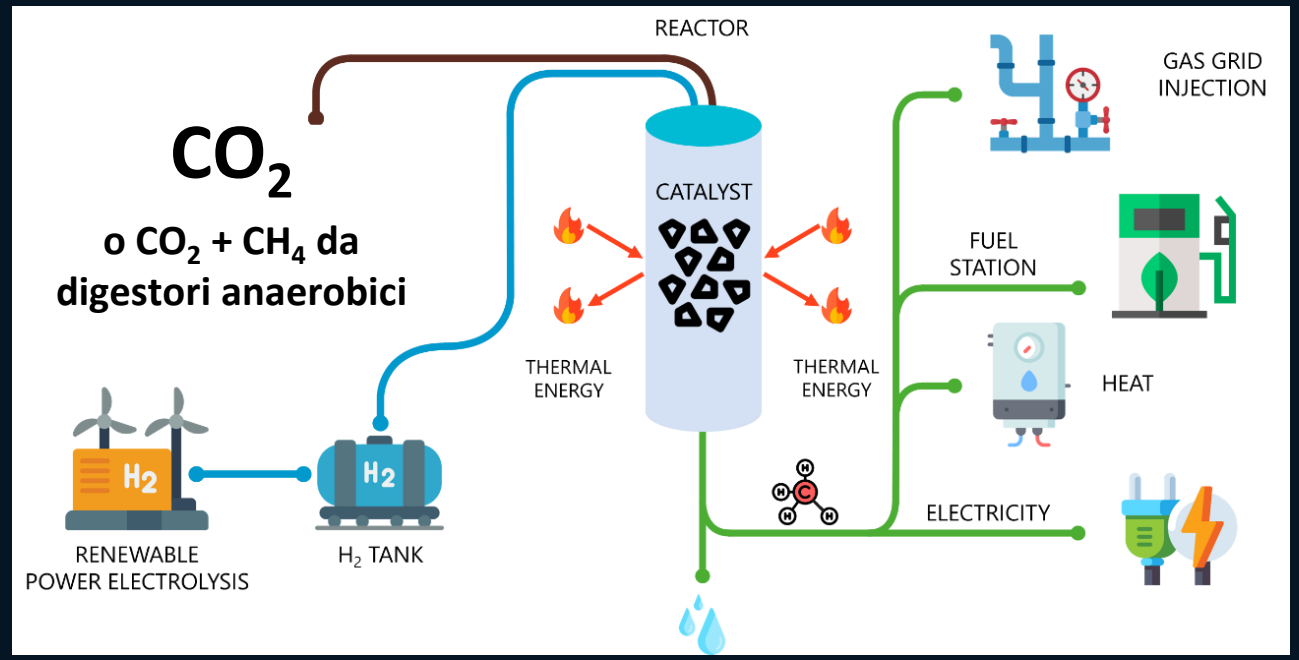


MASE, ex-MITE, progetto "RSH2A_000018 - Stoccaggio e distribuzione di idrogeno attraverso una strategia power-to-gas/gas-to-power con cattura ed utilizzo completi del carbonio - Hydrogen storage and distribution through power-to-gas strategy, with full carbon capture and utilization" - European Union Next-GenerationEU, PNRR – M2C2I3.5 "Ricerca e sviluppo sull'idrogeno" (bando A), CUP: F57G25000180006

Agritech National Research Center - European Union Next-GenerationEU (PNRR – M4C2I1.4 – D.D. 1032 17/06/2022, CN00000022). Tasks 8.2.3, 8.3.2 e 8.4.1.

DIPCHI
DIPARTIMENTO DI CHIMICA

Esempio: H_2 storage mediante metanazione di CO_2



PROs

- Doppio benefit ambientale (Green H_2 e CCU)
- Infrastrutture già presenti
- Iniettabile in rete gas (H_2O e H_2 tolerance!)
- CH_4 già ben regolamentato
- Nessuna modifica per end-user

KEY ISSUES

- Fattibilità tecnica
- Sostenibilità economica

Esempio: H_2 storage mediante metanazione di CO_2

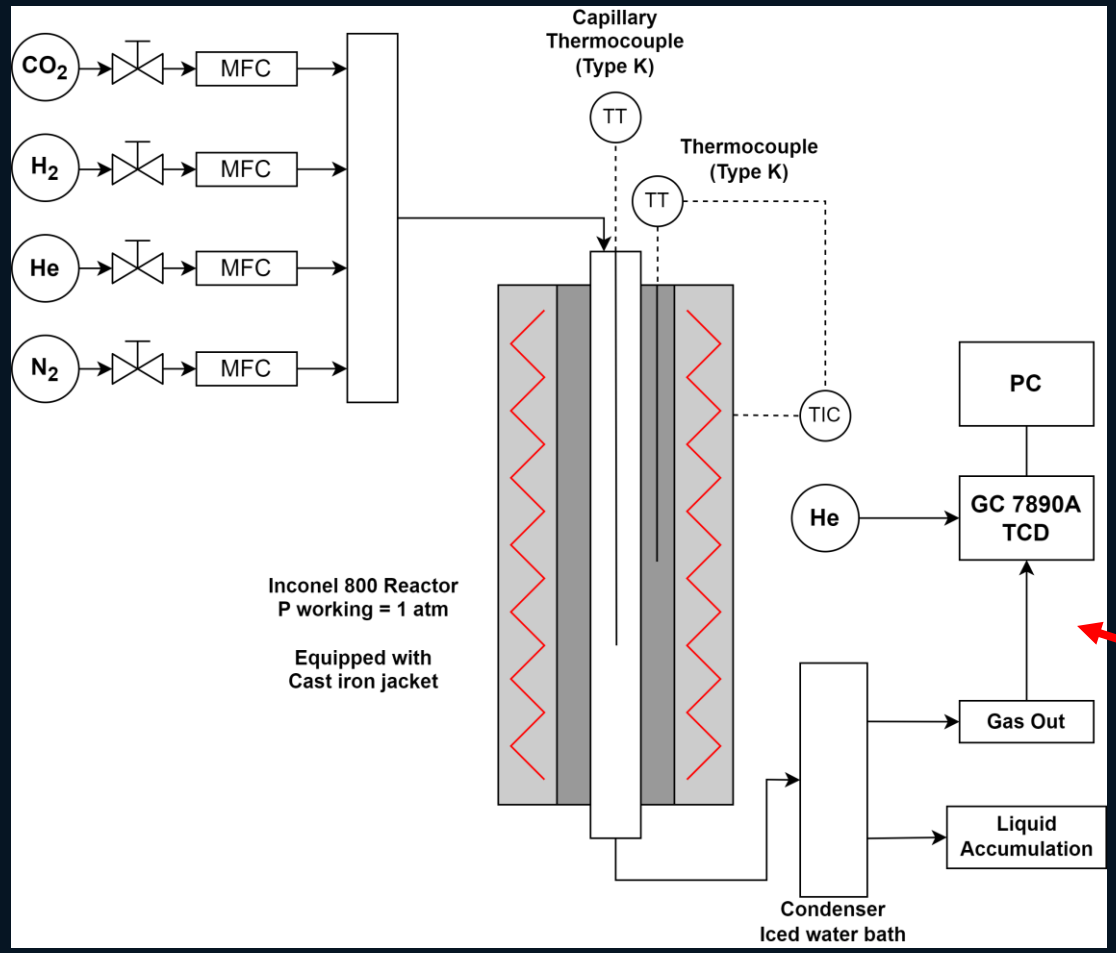
- ***Impiego del Ni come fase attiva***
- Screening dei supporti
  → **Carico di Ni pari al 36% in peso** (ottimizzato nell'intervallo 5–95%)
- Diverse metodologie di preparazione:
  - Impregnazione su supporti commerciali
  - Co-precipitazione
  - Sol-gel
  - Sintesi assistita da ultrasuoni (UniPG)

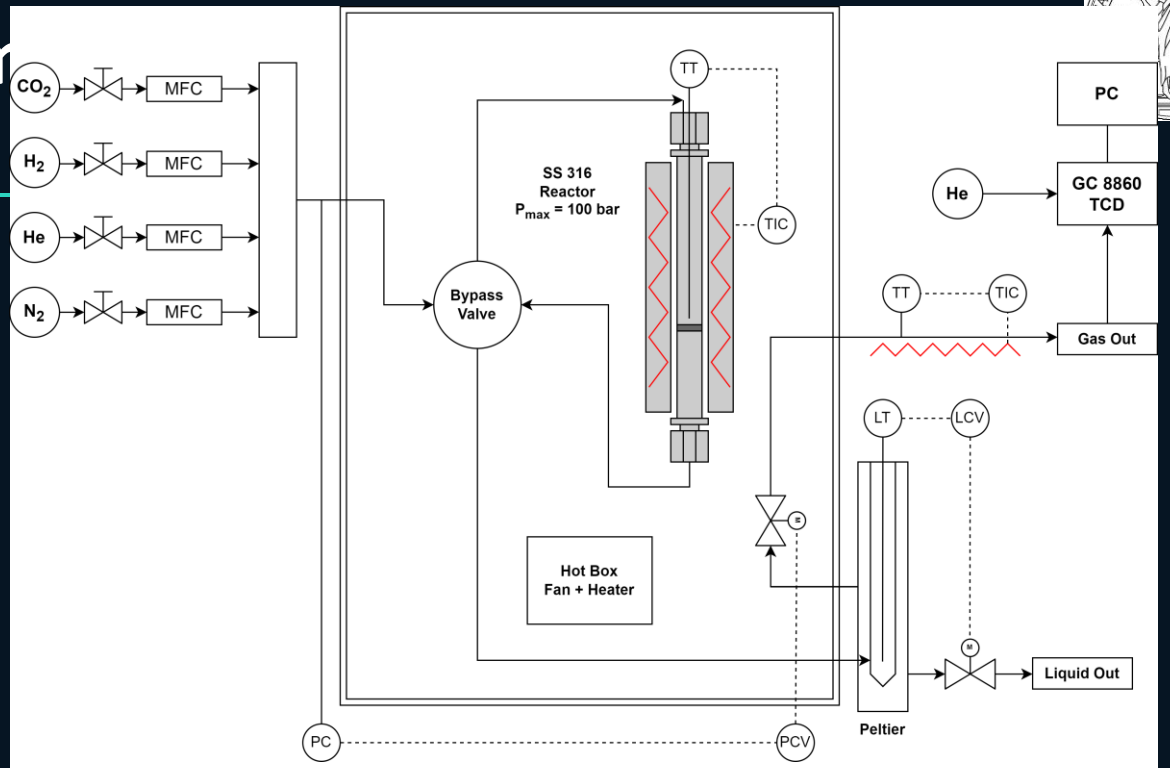
Commerciali
36% Ni/Al_2O_3 (Grade E)
36% Ni/Al_2O_3 (Grade M)
36% Ni/ZSM-5 (Zeolyst CBV)
36% Ni/SiO_2 Fumed
36% Ni/TiO_2 P25 (Evonik)
36% Ni/CeO_2 (Sigma Aldrich)
36% Ni/TiO_2 (Merck)
36% Ni/SiO_2 (Sigma Aldrich)

In-house developed
36% Ni/CeO_2 (CN)
36% Ni/ZrO_2 (CN)
36% Ni/Al_2O_3 (CN)
36% Ni/MgO (CN)

DIPCHI
DIPARTIMENTO DI CHIMICA

Esempio: H_2 storage mediante m

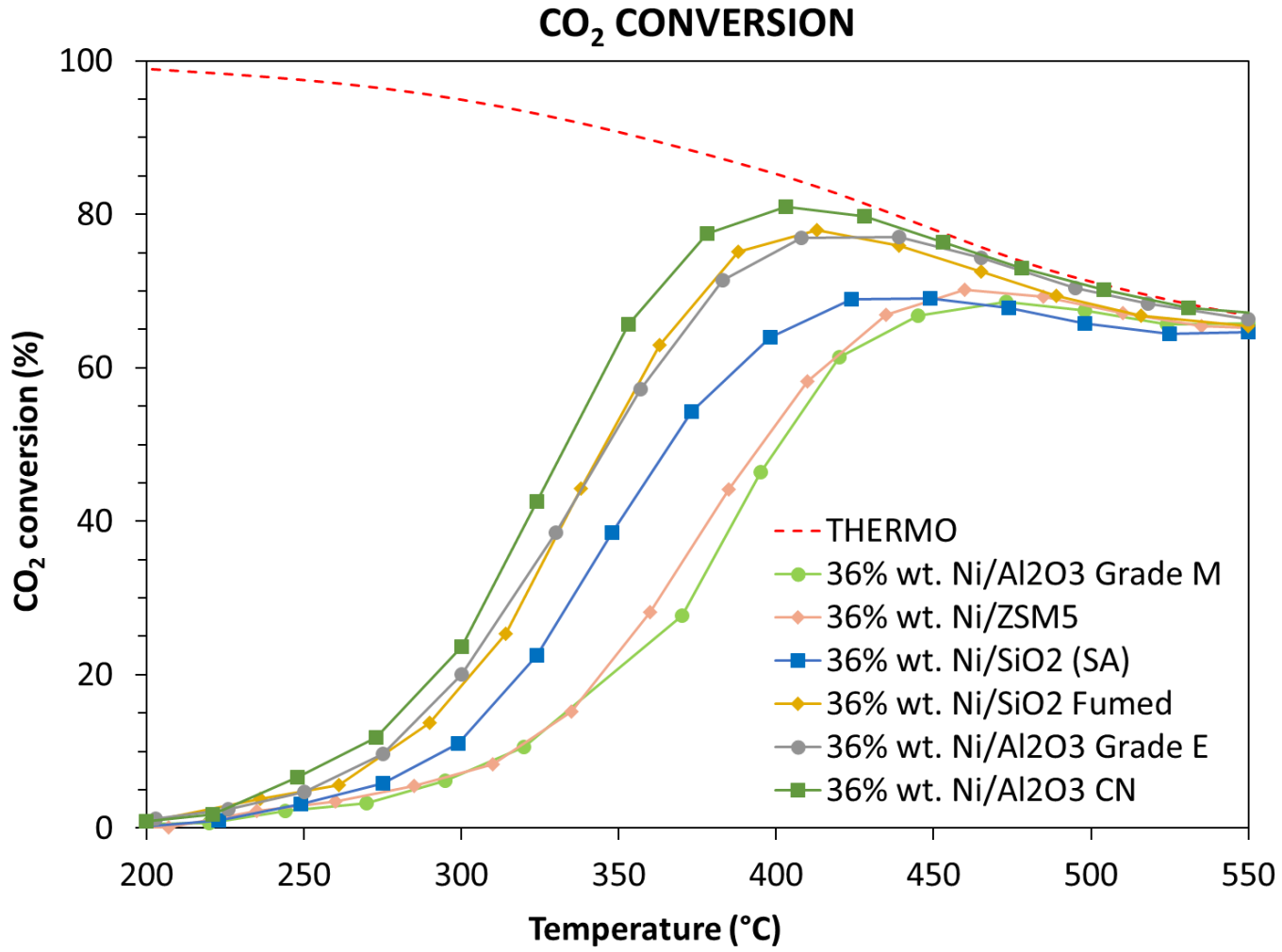




Back pressure regulator (up to 100 bar)

- T ➔ 200/550 °C
- P ➔ 1 atm
- Q_t/W = *60000 mL h^{-1} g_{cat}^{-1}*
- *In-situ catalyst reduction*
- *200 mg cat. (Diluted 1:15)*

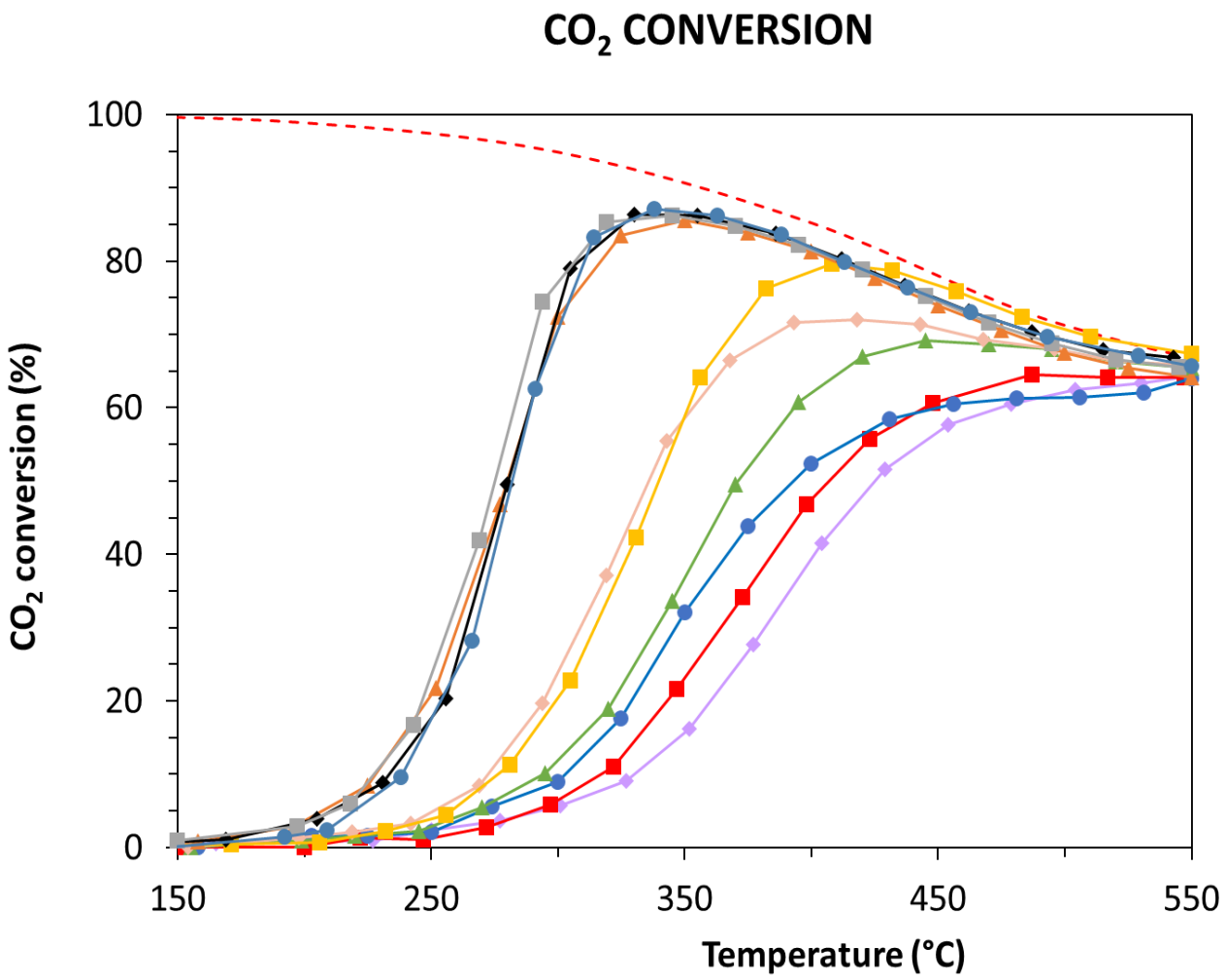
Esempio: H_2 storage mediante metanazione di CO_2



Catalyst	Max CO_2 conv. (%)	T (°C)	S CH_4 (%)
36% Ni/Al_2O_3 (Grade M)	69	473	88
36% Ni/Al_2O_3 (Grade E)	77	408	98
36% Ni/Al_2O_3 (CN)	81	403	99
36% Ni/ZSM-5	70	460	91
36% Ni/SiO_2 (Sigma)	69	424	95
36% Ni/SiO_2 (Fumed)	78	413	99

DIPCHI
DIPARTIMENTO DI CHIMICA

Esempio: H_2 storage mediante metanazione di CO_2



Catalyst	Max CO_2 conv. (%)	T (°C)	S CH_4 (%)
THERMO			
36% wt. Ni/TiO2	64	550	49
36% wt. Ni/MgO CN	65	487	81
36% wt. Ni/ZrO2 CN	64	550	26
36% wt. Ni/CeO2 (Sigma)	69	445	91
36% wt. Ni/CeO2 (MP)	72	418	96
36% wt. Ni/TiO2 P25	80	408	98
36% wt. Ni/CeO2 CN	86	350	99
36% wt. Ni/CeO2 CP	86	355	86
36% wt. Ni/CeO2 SG	86	345	100
36% wt. Ni/CeO2 SG + WI	87	338	98

US-assisted synthesis: similar performance, higher durability

DIPCHI
DIPARTIMENTO DI CHIMICA

Catalizzatori: dalla struttura alla prestazione

Composizione e sintesi

Struttura, riducibilità, dispersione

Intermedi superficiali e vie di reazione

Conversione, selettività, disattivazione

Nostro lavoro: 4 anni, circa 100 catalizzatori sviluppati e testati, circa 10 articoli pubblicati & in progress...



Catalizzatori: dalla struttura alla prestazione

Composizione e sintesi

Struttura, riducibilità, dispersione

Intermedi superficiali e vie di reazione

Conversione, selettività, disattivazione

L’AI trova correlazioni.

La caratterizzazione e la sensibilità chimica stabiliscono se hanno significato chimico.



Metanazione di CO_2: l’IA passa dalla previsione al progetto di nuovi materiali

2023

Yılmaz, Oral, Yıldırım

4.051 punti · 527 esperimenti · 100 articoli

Random forest per conversione di CO_2

10.1016/j.ijhydene.2022.12.197

2025

Yang et al.

Active learning + ensemble interpretabile

Progettazione inversa di catalizzatori

10.1016/j.cej.2025.161154

2025

Zhang et al.

CatBoost spiegabile + verifica di criteri progettuali

Ni, supporto, preparazione e condizioni

10.1021/acssuschemeng.5c02957

La maturità cresce quando il modello produce regole verificabili e propone nuovi esperimenti.

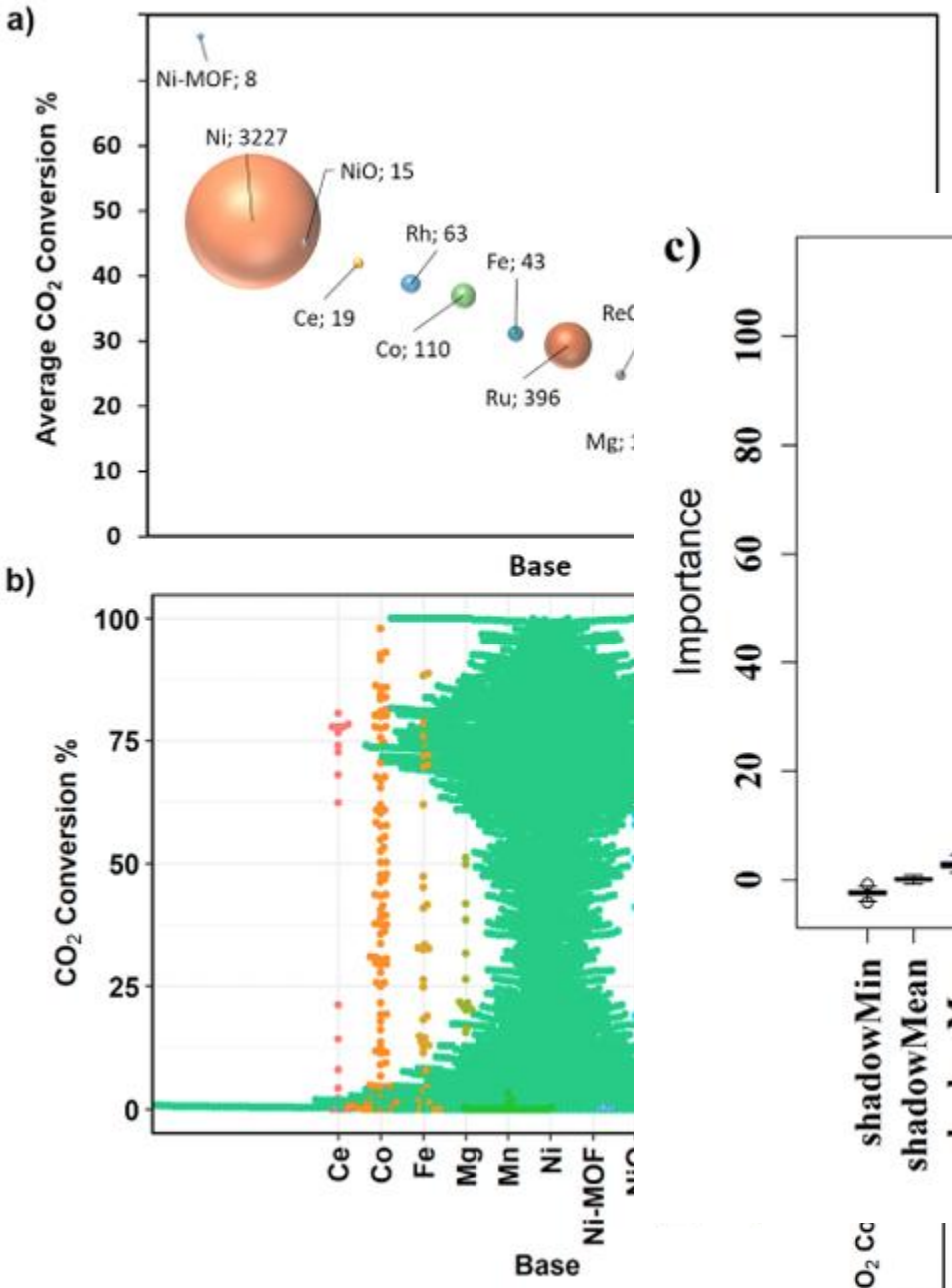
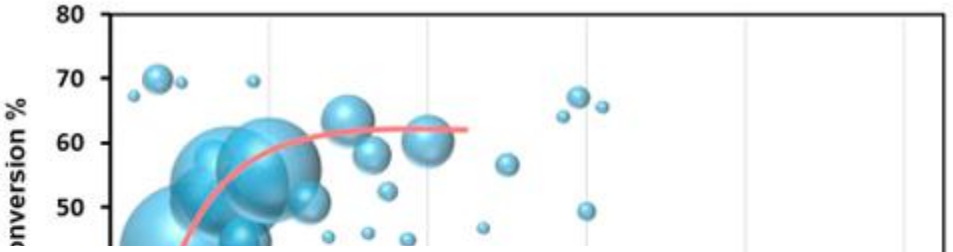
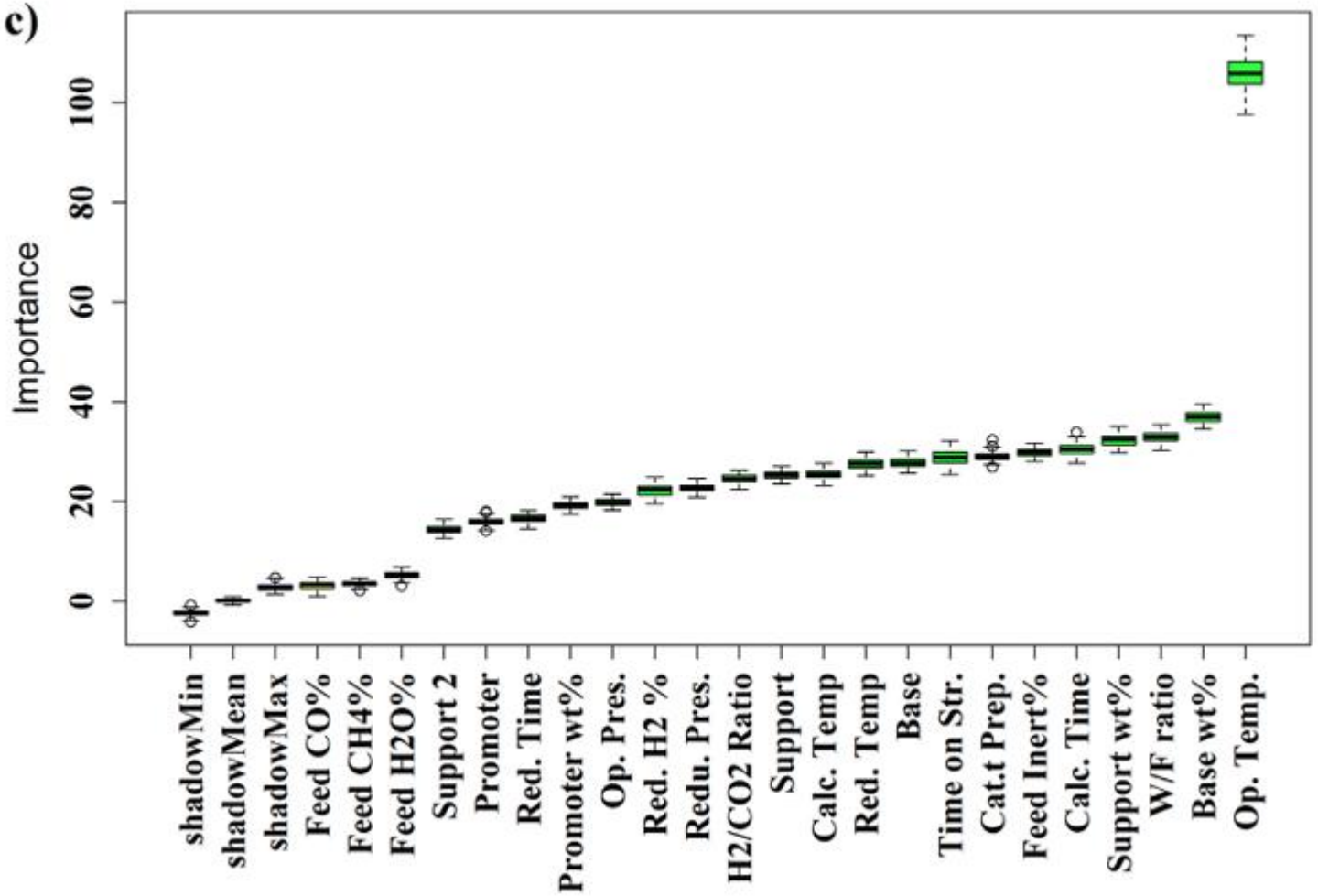
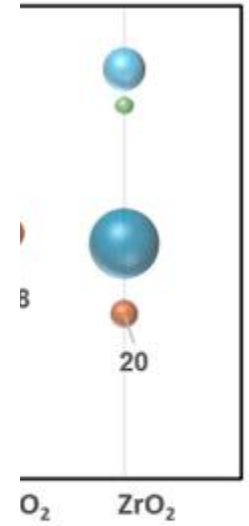


Table 1 – Descriptors used in the dataset a (levels).

Descriptor	Range o
Base	Ce, Co, Fe, Mg, Mn, None, Pd, ReO_x, Rh
Base wt%	0–100
Promoter	Al_2O_3, Ba, C, Ca, Ce, Eu, Fe, Gd, K, La, La







y used

preparation methods for Ni based catalysts (numbers given below bubbles represents the data numbers).



Chemical Engineering Journal 509 (2025) 161154

Contents lists available at ScienceDirect

Chemical Engineering Journal

e al progetto di nuovi materiali

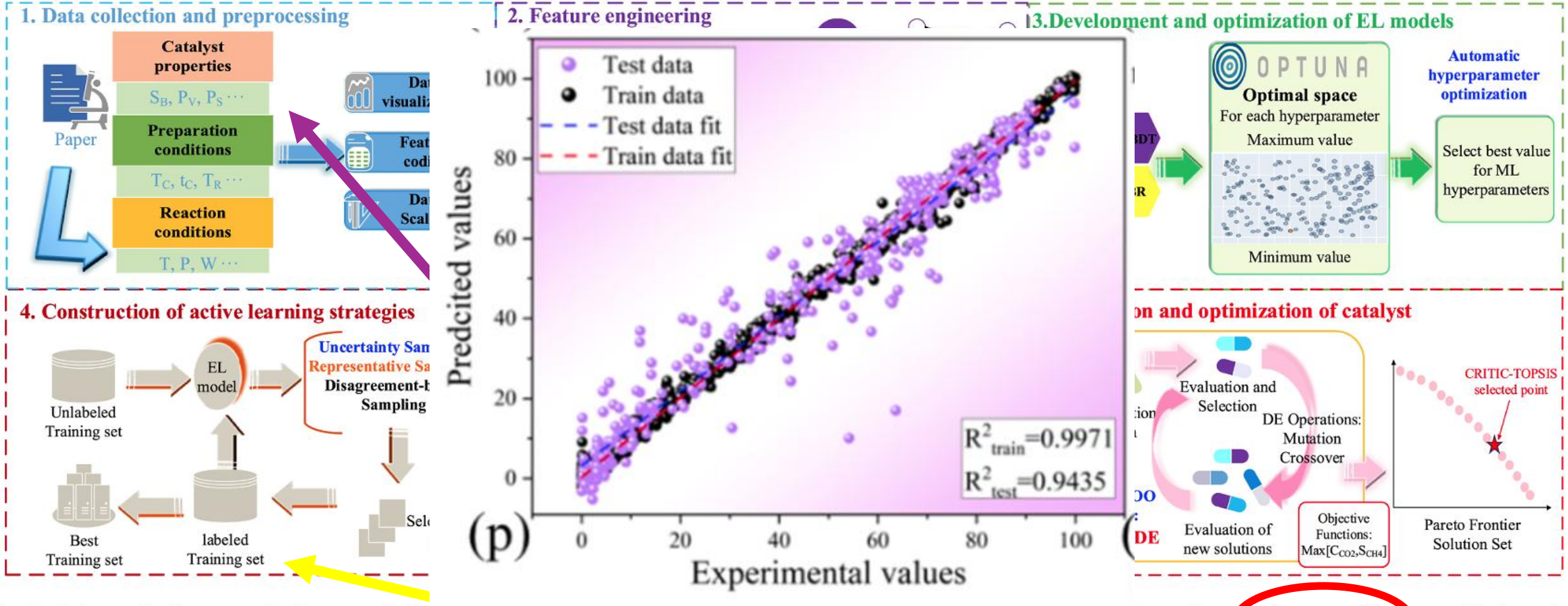


Fig. 1. Schematic diagram of a framework for predicting and optimizing CO$_2$ methanation catalysts using active learning-enhanced interpretable ensemble learning.

Intervento fondamentale del progettista!

Quattro fragilità da gestire

01	**Dati non confrontabili**	Protocolli, unità e condizioni differenti
02	**Bias di pubblicazione**	I risultati negativi restano invisibili
03	**Estrapolazione**	Alta accuratezza interna, bassa affidabilità fuori dominio
04	**Causalità**	La correlazione non identifica il meccanismo

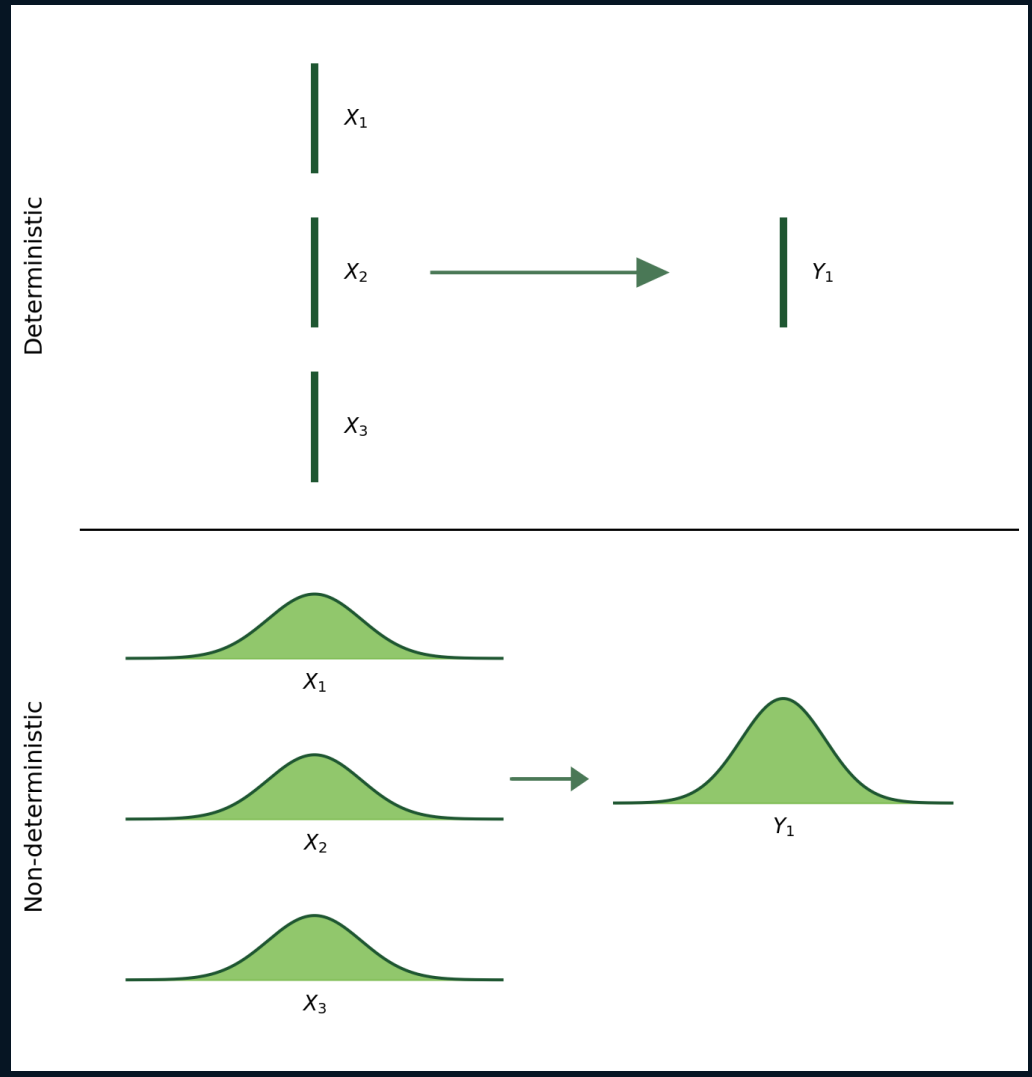
Un modello accurato addestrato su dati non rappresentativi resta inaffidabile.

Metanazione di CO_2: è economicamente fattibile?

Input output analysis: molto semplice

Modello deterministico di costo:
rischia di essere troppo ottimistico

Modello stocastico



Metanazione di CO_2: è economicamente fattibile?

Total Capital Investment

- All costs have been actualized to June 2024 (Chemical Engineering Plant Cost Index - CECPI)

- (#) items have been modified (already existing AD infrastructure)

Peter and Timmerhaus, Plant Design and Economics for Chemical Engineers

Total Equipment Cost			$773,364
Total equipment cost delivered (+ 10%)			$850,700
	Ratio		Cost
1- Direct costs			
1.1 - Total equipment cost (delivered)	1	$	850,700
1.2 - Purchased equipment installation	0.47	$	399,829
1.3 - Instrumentation and controls	0.36	$	306,252
1.4 - Piping	0.2 (#)	$	170,140
1.5 - Electrical systems	0.11	$	93,577
1.6 - Building (including services)	0.09 (#)	$	76,563
1.7 - Yard improvements	0.1	$	85,070
1.8 - Service facilities	0.7	$	595,490
Total direct cost		$	2,577,621
2 - Indirect costs			
2.1 - Engineering and supervision	0.33	$	280,731
2.2 - Construction expenses	0.2 (#)	$	170,140
2.3 - Legal expenses	0.04	$	34,028
2.4 - Contractor's fee	0.22	$	187,154
2.5 - Contingency	0.2 (#)	$	170,140
Total indirect cost		$	842,193
Fixed capital investment (FCI)		$	3,419,814
Working capital (15 % TCI)	0.89	$	603,497
Total capital investment (TCI)		$	4,023,311
Land (2% of TCI)	0.02	$	80,466

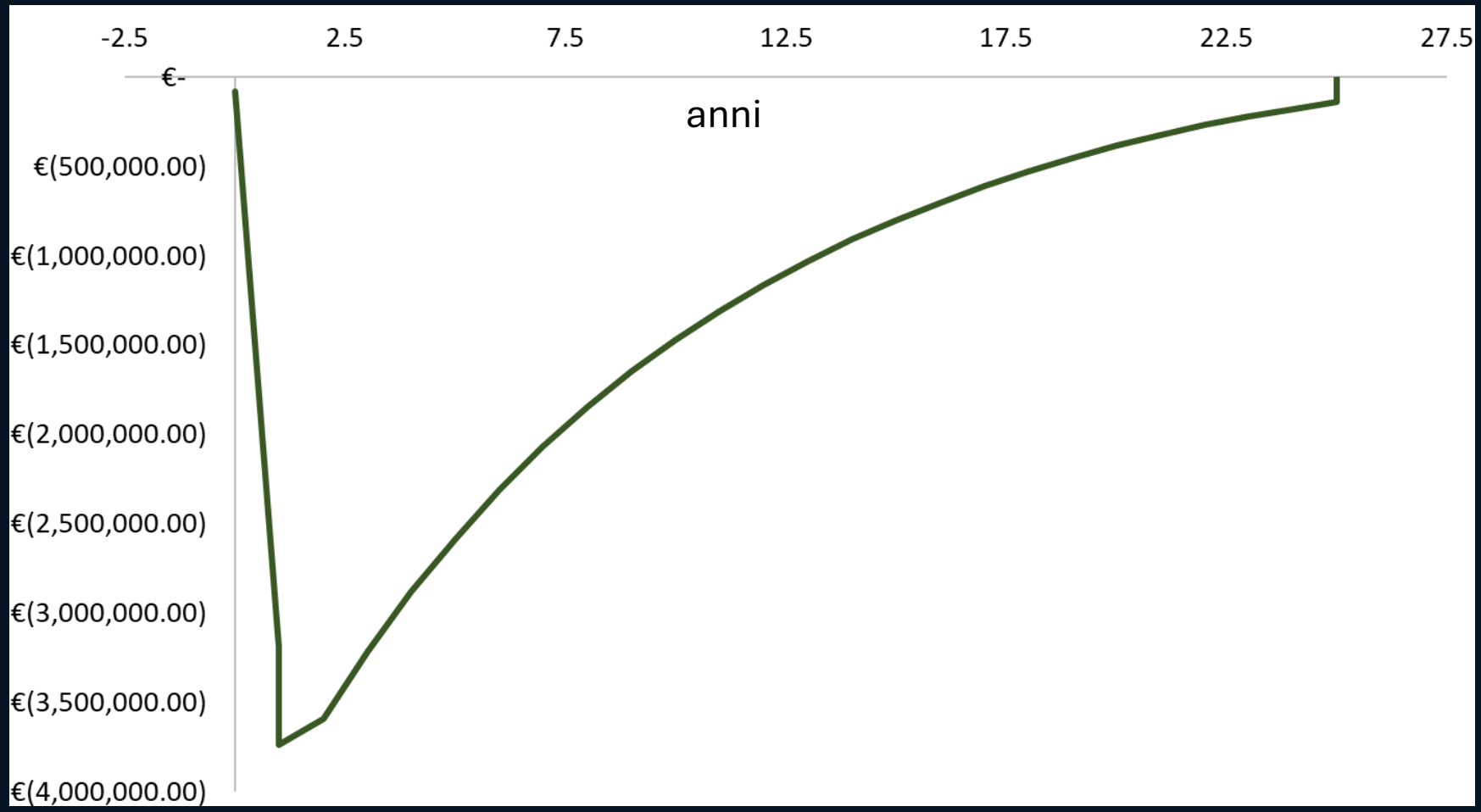
Metanazione di CO_2: è economicamente fattibile?

NPV e Minimum Selling Price (MSP)

Hydrogen
5.5 $/kg

Biogas
12.9 $/MMBTU

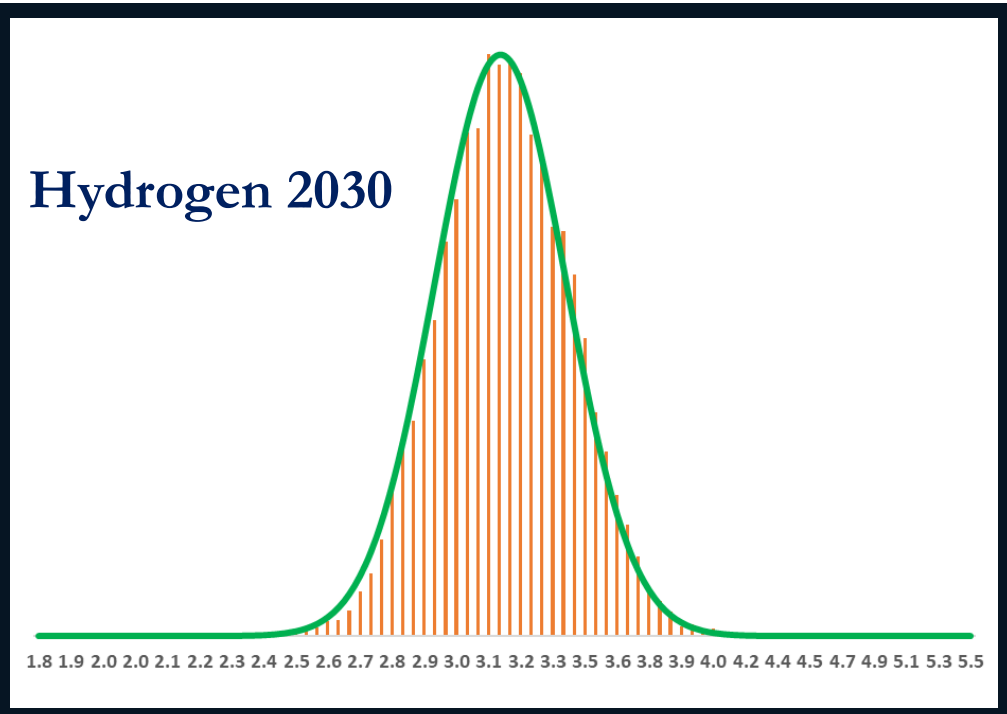
MSP Biomethane
37.8 $/MMBTU



Metanazione di CO_2: è economicamente fattibile?

Approccio stocastico

Material	Min. price	Max. price	Avg. price	Ref. Year
Hydrogen ($/kg)	4.5	6.5	5.5	2023
	2.5	4.0	3.25	2030
	1.0	2.0	1.5	2050
Biogas ($/MMBtu)	9.3	16.5	12.9	2018

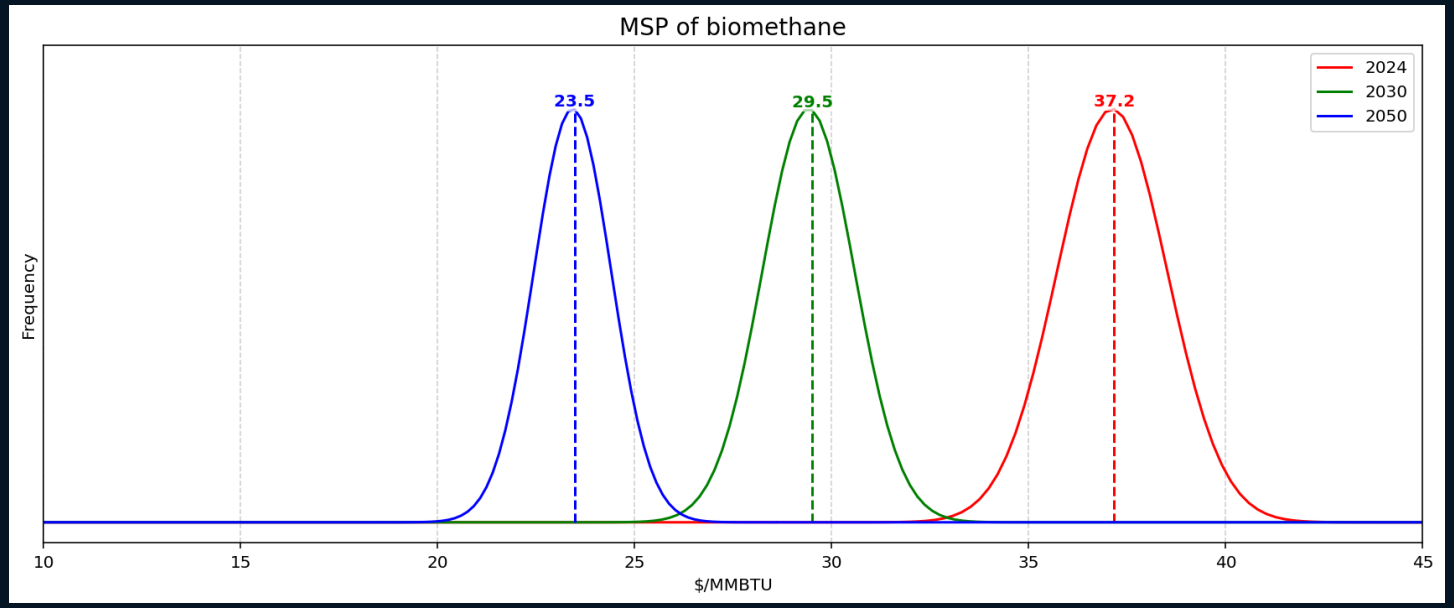


1) Generazione di una distribuzione:
   - Normale
   - Log-normale (sulla base dei prezzi storici)
2) Le distribuzioni dei prezzi sono state costruite in modo da includere >99,7% dei valori nell'intervallo suggerito da McKinsey
3) Generazione di 10.000 coppie casuali di prezzi per ciascuno scenario (2023, 2030 e 2050)
4) Calcolo del Minimum Selling Price (MSP) del biometano corrispondente a NPV = 0

Metanazione di CO_2: è economicamente fattibile?

- Costo del biogas incluso
- La competitività economica dipende fortemente dai prezzi di riferimento assunti per biometano e H_2
- IEA: il costo medio globale attuale del biometano è circa 19 $/MMBTU
- Contratti di fornitura di biometano a 6 anni in Germania: prezzi compresi tra 29 e 42 $/MMBTU

MSP distribution



Qualche conclusione da portare a casa

Il laboratorio autonomo resta un laboratorio scientifico

Il modello propone

La piattaforma sintetizza e misura

I risultati aggiornano il modello

Il ricercatore definisce domanda, vincoli e significato

Automazione del ciclo ≠ automazione del giudizio



Qualche conclusione da portare a casa

01	**Il materiale vive nel processo**	Le proprietà intrinseche acquistano valore solo nelle condizioni reali di funzionamento e sulla scala reale dell'impianto.
02	**L'IA funziona meglio con la fisica**	Dati, esperimenti e modelli di primo principio devono correggersi a vicenda.
03	**L'obiettivo è una tecnologia sostenibile**	Scalabilità, energia, costo e impatto ambientale decidono la soluzione finale.

L'innovazione energetica nasce dall'integrazione di materiali e processi: l'intelligenza artificiale è uno degli strumenti che (se ben utilizzato) può accelerare lo sviluppo


Grazie
per l'attenzione