VALUTAZIONE DELLE CONSEGUENZE PER RILASCI ACCIDENTALI DI GNL: CONFRONTO TRA MODELLI INTEGRALI E CODICI CFD

Fiorucci, A.[1], Pontiggia, M.[1], Derudi, M.[1], Pendino, R.[2], Uguccioni, G.[2], Rota, R.[1]

[1]Politecnico di Milano, Dip. Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica "G. Natta", via Mancinelli 7, Milano, 20131, Italia
[2]D'Appolonia S.p.A., via Martiri di Cefalonia 2, San Donato Milanese (MI), 20097, Italia

SOMMARIO

L'obiettivo principale di questo lavoro è stato l'analisi delle conseguenze di rilasci accidentali di GNL (Gas Naturale Liquefatto). Trattando con un gas altamente infiammabile, in caso di incidente che coinvolge una dispersione del gas denso, è importante prevedere le dimensioni di nuvola e i profili di concentrazione al suo interno per discriminare la tipologia e l'entità del fenomeno coinvolto in modo da predisporre le misure di sicurezza più adeguate.
Lo studio della dispersione del gas in ambiente esterno è influenzato da diversi parametri; i più significativi sono la tipologia del rilascio e la presenza di ostacoli. L'approccio attualmente più utilizzato per questo tipo di analisi è l'impiego di Modelli Integrali che risolvono il campo di moto tramite opportune semplificazioni. I codici CFD (Computational Fluid Dynamics), invece, risolvono numericamente le equazioni di Navier-Stokes, permettendo un'analisi dettagliata del campo di moto; essi, tuttavia, richiedono maggiori risorse di calcolo.
Il lavoro è stato quindi articolato in due fasi: il confronto dei modelli attualmente utilizzati per la valutazione del termine sorgente e la verifica dell'influenza degli ostacoli nella dispersione di gas per sviluppare un criterio che permetta di discriminare l'utilizzo di un codice CFD (più dettagliato ma con maggiori oneri computazionali) o di un Modello integrale per un'adeguata analisi delle conseguenze di rilasci accidentali di GNL.

1. INTRODUZIONE

L'incremento delle importazioni di GNL in Europa e l'esigenza di rendere gli approvvigionamenti più flessibili, ha indotto la necessità di costruire nuovi rigassificatori nel nostro paese. Il bisogno di incrementare le quantità stoccate di GNL ha causato atteggiamenti di preoccupazione nell'opinione pubblica e una richiesta maggiore sullo studio di possibili scenari incidentali, anche derivanti da potenziali attacchi terroristici.
Dal rilascio del fluido infiammabile criogenico si può determinare, infatti, la formazione di una pozza, la cui evaporazione contribuisce alla dispersione del materiale. Lo studio del fenomeno dispersivo è di primaria importanza nel campo dell'analisi del rischio, in quanto definisce le zone di rischio raggiunte dalla miscela gassosa che si trova all'interno dei limiti di infiammabilità e la tipologia di incidente coinvolto.
Attualmente, in questo tipo di analisi, vengono ampiamente utilizzati i Modelli integrali [1], che generalmente offrono un approccio semplice e richiedono un ridotto onere computazionale, in termini di tempo e potenza di calcolo. Tuttavia, essi risolvono le equazioni del moto in forma approssimata, garantendo una modellazione sostanzialmente mono-dimensionale del fenomeno. Le caratteristiche ambientali, sia fisiche che geometriche, vengono quindi riassunte in pochi parametri caratteristici; le correlazioni utilizzate per stimare questi parametri sono generalmente semi-empiriche e vengono ottimizzate sulla base dei dati sperimentali disponibili. Tali esperimenti, per rischio connesso all'impiego dei composti utilizzati, sono stati, in generale, condotti in zone isolate, in campo aperto o in presenza di pochi ostacoli [2].
D'altro canto, lo sviluppo della potenza di calcolo sta ormai progressivamente affermando la diffusione di codici di fluidodinamica computazionale (CFD); questo approccio, basato sulla risoluzione numerica delle equazioni di Navier-Stokes su di una griglia di calcolo, permette di analizzare dettagliatamente l'influenza geometrica dell'ambiente e di prevedere scie, canalizzazioni, zone di ristagno e di ricircolo che possono condizionare marcatamente il rilascio e la dispersione di un composto tossico o infiammabile [3, 4]. Come è facile prevedere, in questo caso la potenza di calcolo richiesta è sensibilmente maggiore rispetto a quella richiesta per l'utilizzo di Modelli integrali.

Nella prima fase di questo lavoro, attraverso approcci consolidati di analisi di rischio, sono stati definiti alcuni possibili scenari di rilascio di GNL, al fine di analizzare come PHAST, attualmente uno dei Modelli integrali privilegiati nella modellazione delle conseguenze incidentali, modelli il termine sorgente; è stato eseguito un confronto con alcuni dati sperimentali di letteratura [5, 6] e la comparazione di PHAST con altri modelli, in particolare LPOOL.
Stabilita una metodologia per la valutazione del termine sorgente, la seconda fase del lavoro è stata dedicata allo studio della dispersione, in particolare per indagare l'influenza degli ostacoli sulla diluizione dei gas infiammabili costituenti la nube, confrontando le previsioni di PHAST con le simulazioni ottenute mediante un codice CFD commerciale. Anche i modelli utilizzati nel codice CFD sono stati preliminarmente convalidati tramite confronto con dati sperimentali; successivamente, sono state effettuate alcune simulazioni in uno scenario geometricamente complesso che costituisse una riproduzione realistica di un rigassificatore. I risultati hanno evidenziato come, in presenza di ostacoli multipli, i Modelli integrali come PHAST, perdano in accuratezza, e i codici CFD, pur comprendendo un aggravio computazionale non trascurabile, diventino irrinunciabili al fine di ottenere previsioni attendibili delle conseguenze di un potenziale incidente.

2. VALUTAZIONE DEL TERMINE SORGENTE

2.1 Modelli implementati in PHAST

Il codice PHAST contiene DISC (DISCharge), una raccolta di modelli per il calcolo dei termine di sorgente per rilasci continui e istantanei da tubazioni, serbatoi o apparecchiature; a questi si aggiunge l'ATEX (Atmospheric Expansion) Theory, per la definizione delle condizioni finali delle variabili di stato in seguito a scarico a pressione ambiente, attraverso l'assunzione di conservazione dell'energia o di rilascio isoentropico [7]; PVAP (Pool VAPorization) che descrive, per un rilascio liquido l'espansione ed evaporazione della pozza su terra e su acqua. In particolare, per le simulazioni di rilasci di GNL effettuate il programma ha utilizzato i seguenti modelli: l'Orifice model, la teoria ATEX e il Modello PVAP.
L'orifice model (efflusso monofase da foro) simula un rilascio continuo e costante nel tempo da un piccolo foro in un vessel. Esso permette il calcolo delle conseguenze critiche assumendo condizioni stazionarie corrispondenti alla cosiddetta portata di picco. Il modello risulta valido per fluidi allo stato di vapore, liquido o bifase. A fronte della dichiarazione di pressione (P_{st} [Pa]) e temperatura di stoccaggio (T_{st} [K]), frazione massica (η_{st}), massa del fluido, area dell'orifizio [m^2] e, in caso di stoccaggio di liquidi, battente idrostatico ΔH [m], il modello è in grado di fornire portata di rilascio (Q [kg s^{-1}]), durata del rilascio (t_{rel} [s]), condizioni all'orifizio (P_0 [Pa], T_0 [K], frazione in massa di liquido η_{L0}). Le equazioni che descrivono le condizioni all'orifizio sono pertanto la conservazione di energia e la conservazione di entropia:

$$h\left(P_i, T_i, \eta_{L0}\right) = h\left(P_0, T_0, \eta_{L0}\right) + \frac{u_0^2}{2} \tag{1}$$

$$S\left(P_i, T_i, \eta_{L0}\right) = S\left(P_0, T_0, \eta_{L0}\right) \tag{2}$$

La pressione all'orifizio P_0 eguaglia la pressione ambiente P_a nel caso di flusso non critico ed invece nel caso di flusso sonico risulta P_0=max[P_a, P_c]. La pressione critica P_C corrisponde al valore per cui è massimizzata la portata massica G_0 attraverso l'orifizio:

$$G_0 = \frac{u_0}{v_0} \tag{3}$$

Il volume specifico (4) e la portata massica rilasciata (5) possono, quindi, essere espressi come segue:

$$v_0 = \frac{\eta_{L0}}{\rho_{L0}} + \frac{\eta_{V0}}{\rho_{V0}} \tag{4}$$

$$Q^* = A_0 G_0 \tag{5}$$

La portata, in realtà, per la presenza degli effetti di attrito e la contrazione della vena fluida scaricata deve essere ridotta. Tale fenomeno è considerato con l'introduzione del coefficiente di scarico C_D, che in PHAST è assunto pari a 0,6.

L'ATEX offre, invece, due modelli costituiti da cinque equazioni, i quali differiscono tra loro per l'assunzione di "conservazione della quantità d moto" o di "conservazione dell'entropia". I due modelli si basano su tre equazioni di conservazione (massa, quantità di moto/entropia, energia) e due equazioni di stato (densità ed entalpia):

$$\rho_f A_f u_f = \rho_0 A_0 u_0 \tag{6}$$

$$\rho_f A_f u_f^2 = \rho_0 A_0 u_0^2 + \left(P_0 - P_f\right) A_0 \tag{7}$$

oppure: $s\left(T_0, P_0\right) = s\left(T_f, P_a, f_{Lf}\right)$ (8)

$$\rho_f A_f u_f \left[h_f + \frac{1}{2}u_f^2\right] = \rho_0 A_0 u_0 \left[h\left(P_0, T_0, f_{L0}\right) + \frac{1}{2}u_0^2\right] \tag{9}$$

$$\rho_f = \rho_f\left(P_a, T_f, f_{Lf}\right) \tag{10}$$

$$h_f = h_f\left(P_a, T_f, f_{Lf}\right) = f_{Lf} h_L\left(P_a, T_f\right) + \left(1 - f_{Lf}\right) h_v\left(P_a, T_f\right) \tag{11}$$

Usualmente la scelta dell'approccio (isoentropico o isoentalpico) dipende dall'analisi che si vuole effettuare: se si considera che lo stato finale sia un getto in movimento la trasformazione può solitamente essere considerata isoentropica, mentre se lo stato finale viene considerato in quiete (pozza di liquido) la trasformazione può essere considerata isoentalpica. A causa della povertà di informazioni termodinamiche utilizzate dal modello spesso, l'ipotesi di isoentropicità predice solitamente temperature troppo basse alla fine dell'espansione, mentre il modello di conservazione dell'energia comporta velocità post-espansione inferiori a quelle ottenute con l'ipotesi alternative.
Il modello PVAP, infine, permette di valutare l'espansione ed evaporazione della pozza; esso non è in grado di simulare l'evaporazione di miscele che vengono considerate come pseudo-componente. La forma della pozza è ipotizzata cilindrica di raggio r(t) e spessore uniforme h(t), con sorgente localizzata nel centro. La variazione della massa è calcolata dall'equazione di conservazione:

$$M_{pool}\left(t\right) = \pi r^2\left(t\right) h\left(t\right) \rho_L \tag{12}$$

$$\frac{dM_{pool}}{dt} = S\left(t\right) - E_{vap}\left(t\right) - E_{sol}\left(t\right) \tag{13}$$

Con ρ_L densità del liquido, $S(t)$ massa rilasciata nel tempo, $E_{vap}(t)$ massa vaporizzata, $E_{sol}(t)$ massa dissolta in acqua. L'espansione della pozza su terra è calcolata integrando numericamente l'equazione data dal modello di Oopschoor (1979):

$$\frac{dr}{dt} = \left[2g\left(h - h_{\min}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{14}$$

In cui r raggio della pozza, t tempo dall'inizio del rilascio, g accelerazione di gravità, h spessore della pozza, h_{min} minimo spessore della pozza.
Si assume quindi che la "driving force" per l'espansione della pozza sia data dalla differenza idrostatica tra lo spessore tempo-dipendente dello strato liquido e il minimo spessore di pozza caratteristico del substrato. Il rateo di espansione risulta decrescente con la diminuzione dello spessore. I valori di spessore minimo per diverse superfici utilizzati nel software sono sintetizzati in tabella 1:

Tabella 1. Spessori minimi specifici per la superficie di rilascio.

Superficie	Terreno umido	Terreno secco	Calcestruzzo	Calcestruzzo isolante
Spessore [m]	0,01	0,02	0,005	0,005

Il calcolo dell'evaporazione da pozza è basato sui meccanismi di scambio termico principali, per l'ebollizione e la vaporizzazione, cioè la conduzione di calore dal suolo, la convezione dell'aria

nell'ambiente, l'irraggiamento e la diffusione di vapori. Questo comportamento è discretizzato in una serie di intervalli temporali, in cui vengono calcolati i bilanci di massa ed energetici, sia in caso di pozza in ebollizione che in evaporazione. Per ogni sequenza temporale il programma calcola il raggio massimo della pozza e valuta il bilancio energetico, determinando così i cambiamenti nella temperatura di pozza e il rateo di vaporizzazione e derivando i valori di input per la fase successiva.

2.2 Modello LPOOL

La modellazione del rilascio con LPOOL si basa su quattro assunzioni principali: i liquidi e i vapori sono assunti essere ideali; quando è necessario considerare un singolo valore per rappresentare le proprietà di miscela, come ad esempio la densità di pozza, le proprietà dei componenti sono mediate; tutti i liquidi non reagiscono con la superficie e le miscele multicomponente sono internamente non reagenti.
La modellazione della pozza è definita in accordo al modello di Shaw e Briscoe [8], che predicono il raggio di pozza come funzione del tempo di pozze circolari con spessore uniforme. Tale modello è basato sui medesimi principi fisici contenuti nel modello di Oopschoor inserito nel programma PHAST, ma, a differenza di PHAST, non è inserito alcun sottomodello specifico per la valutazione della formazione di pozze su acqua. Bisogna sottolineare inoltre l'assenza di un database in LPOOL che generi in automatico i valori degli spessori minimi della pozza, caratterizzanti il raggio massimo per le diverse superfici.

2.3 Confronto e convalida dei modelli

La scelta delle prove sperimentali per il processo di convalida è stata limitata dal ridotto numero di prove sperimentali disponibili in letteratura adatte allo studio di questo fenomeno. In particolare sono stati considerati esperimenti appartenenti alle prove di Burro, Esso e Maplin Sands. Le caratteristiche dei rilasci sono riportate in tabella 2.

Tabella 2. Condizioni sperimentali delle prove selezionate per la convalida.

	Volume totale [m^3]	Durata (s)	Portata rilasciata [m^3 hr^{-1}]	Velocità vento [m s^{-1}]	Classe di stabilità	Rugosità superfic. [m]	T_{amb} [K]	T_{sub} [K]	Umidità relative [%]
Burro 9	24,2	79	1130,4	6,5	D	0,0002	308,5	310,1	12
Esso 14	0,93	5,2	643,8	9,4	D	0,0002	299,1	295,2	79
Esso 17	8,36	31	970,84	4	D	0,0002	291,1	295,2	85
MS 29	21,9	320,5	245,99	7,4	D	0,00034	289,2	289,9	52

Le variabili di output considerate sono la massa evaporante nel tempo [kg s^{-1}] e il raggio di pozza [m]. Esse sono state scelte in quanto caratterizzanti il fenomeno di formazione di pozza e rilevanti dal punto di vista della sicurezza, in quanto influiscono sul fenomeno della dispersione e sui rischi di esplosione. I risultati ottenuti dalle simulazioni per i casi sperimentali considerati sono riassunti nelle tabelle 3 e 4. Dall'analisi effettuata, risulta che entrambi i modelli predicono bene entrambe le variabili di output, ma in particolare la velocità di vaporizzazione di pozza, che è la variabile di preminente importanza nel campo dell'analisi di sicurezza, in quanto determinante nella successiva fase di dispersione. Il raggio massimo di pozza è lievemente sovrastimato dal programma LPOOL, il contrario in PHAST. Tali differenze sono riconducibili ai differenti sottomodelli implementati per la descrizione della fenomenologia della formazione di pozza.
La tendenza a sottostimare la velocità di evaporazione massica del composto rilasciato in entrambi i modelli è riconducibile all'assenza di modellazione di non idealità che contribuiscono a tale fenomeno, sia in LPOOL sia in PVAP.

Tabella 3. Massimo raggio di pozza [m].

	Sperimentale	LPOOL	PVAP
Burro 9	10	15.0	12.1
Esso 14	7	7.3	4.0
Esso 17	14	15.5	9.0
MS 29	10	7.8	6.2

Tabella 4. Portata evaporante [kg s^{-1}].

	Sperimentale	LPOOL	PVAP
Burro 9	95	133,0	114,8
Esso 14	17,6	14,4	12,8
Esso 17	69	67,5	70,0
MS 29	27	23,7	24,0

3. DESCRIZIONE DEL MODELLO CFD

I codici di fluidodinamica computazione risolvono numericamente le equazioni del moto, discretizzando il dominio tramite l'impiego di una griglia di calcolo e trasformando il problema da un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali a un sistema di equazioni algebriche. L'algoritmo risolve, per ogni centro-cella, le equazioni necessarie a descrivere tutti i fenomeni fisici coinvolti e memorizza la soluzione discreta. Per tener conto della turbolenza atmosferica sono state utilizzate le equazioni RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes); per il calcolo della viscosità turbolenta è stato impiegato il modello k-ε. Questo è un modello a due equazioni per la valutazione della turbolenza viscosa, ampiamente utilizzato per questo tipo di problematiche per il buon compromesso tra bontà delle previsioni e stabilità di calcolo [9]. L'impiego di questo modello nel sistema di equazioni di trasporto è raggiunto tramite l'introduzione di due nuove variabili: l'energia cinetica turbolenta (k) e la dissipazione turbolenta (ε).
Equazione di continuità (15), equazione di trasporto del momento (16), equazione di trasporto dell'energia (17):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} \right) = 0 \tag{15}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho \vec{v} \right) + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v}\vec{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\overline{\overline{\tau}} \right) + \rho \vec{g} \tag{16}$$

$$\frac{\partial \left(\rho c_V T \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v} c_p T \right) = \nabla \cdot \left(k \nabla T \right) \tag{17}$$

In cui ρ è la densità, t il tempo, v la velocità, p è la pressione, τ lo sforzo viscoso, g l'accelerazione di gravità, c_v e c_p i calori specifici a volume e pressione costante, T la temperatura, k la conducibilità termica.
I valori di k e ε vengono direttamente calcolati dalle corrispettive equazioni di trasporto:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho k \right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho k u_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \tag{18}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho \varepsilon \right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho \varepsilon u_i \right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k}\left(G_k + C_{3\varepsilon} G_b \right) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \tag{19}$$

in cui G_k è il termine di produzione dovuto a shear stress, G_b il termine legato al galleggiamento, Y_m il termine legato alla comprimibilità, mentre $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, $C_{\varepsilon 3}$, σ_k, σ_ε, C_μ sono costanti semiempiriche del modello. In questo lavoro sono stati utilizzati i valori proposti da Jones e Launder [10], riportati in tabella 5:

Tabella 5. Costanti del modello k-ε.

$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	σ_k	σ_ε	C_μ
1,44	1,92	1,0	1,0	1,3	0,09

4. CONVALIDA DEL CODICE CFD

4.1 Descrizione degli esperimenti della serie COYOTE

Gli esperimenti della serie Coyote sono stai condotti dal Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) e dal Naval Weapons Center (NWC) a China Lake (California, US) nel 1981, sotto la responsabilità del Dipartimento per l'energia americano e del Gas Research Institute [11]. L'obbiettivo era la determinazione del trasporto e della dispersione di vapori da versamenti di GNL e di analizzare le conseguenze dell'innesco delle nubi di vapore. Questi esperimenti prevedevano il rilascio di grosse quantità di GNL e la dispersione della nuvola di vapori in atmosfera; il combustibile liquefatto veniva spillato in un bacino idrico circolare di diametro 58 [m], su una piastra metallica che limitasse la penetrazione del fluido nell'acqua. Il livello dell'acqua era a circa 1,5 [m] sotto il livello del terreno circostante.
Lo scopo era la determinazione delle caratteristiche della fiamma risultante dall'innesco della nuvola di vapori formata successivamente alla fuoriuscita del GNL; l'innesco della nuvola, ad un certo intervallo di tempo dopo l'inizio del versamento, ha permesso di misurare l'intensità della radiazione, la velocità di fiamma e l'onda di sovrapressione. I dati sono stati campionati utilizzando anemometri (per misurare la velocità e la direzione del vento), termocoppie (misura della temperatura), sensori per la concentrazione del gas, calorimetri (per la misura dei flussi termici) e sensori per la velocità di fiamma.
Per la convalida dei modelli utilizzati dal codice CFD si è concentrata l'attenzione sulla sola fase di dispersione (non è stato simulato l'innesco dei vapori) per l'esperimento n.3. I dati di confronto sono le concentrazioni di GNL nel tempo a due diverse distanze sottovento e ad un'altezza di 1,5 [m] dal suolo.

4.2 Set-up delle simulazioni CFD

La fase preliminare della simulazione è la realizzazione della griglia di calcolo per la discretizzazione del dominio. E' stato considerato un dominio lungo 500 [m], largo 200 [m] e alto 50 [m] per evitare che le condizioni di bordo alterassero le previsioni della simulazione. Si è sfruttata la simmetria del problema ed è stato quindi studiato solo metà del dominio di calcolo. La griglia sul terreno è stata realizzata con elementi triangolari che hanno permesso infittimenti locali senza subire deformazioni considerevoli, ed è stata infittita in corrispondenza dei bordi del bacino e dei punti di misurazione della concentrazione di gas. Gli elementi così realizzati sono stati estrusi in direzione verticale con spaziatura variabile per ottenere celle molto fitte in corrispondenza della pozza e del terreno, dove i gradienti sono più forti e la soluzione deve essere più accurata. Sono state utilizzate circa 300k celle. In figura 1 sono mostrati gli elementi disegnati in prossimità del bacino e la griglia ottenuta sul terreno. Sono state inoltre effettuate simulazioni con griglie differenti per verificare l'indipendenza dei risultati dalla griglia utilizzata.
Successivamente sono state definite le condizioni di bordo per il problema: il piano di simmetria è stato caratterizzato da derivata nulla per tutte le grandezze trasportate, al terreno è stata imposta la condizione di velocità nulla (no-slip) e temperatura fissata, velocità nulla e flusso termico nullo (adiabatico) alle pareti della depressione presente nel terreno; al fondo del bacino, invece, è stata imposto un flusso diffusivo per rappresentare l'evaporazione del GNL. Per modellare il progressivo espandersi della pozza di GNL sulla superficie dell'acqua, la diffusione non è stata immediatamente imposta da tutta l'area; ipotizzando uno spessore caratteristico dello strato di GNL, è stato stimato l'evolvere del raggio della pozza nel tempo e la diffusione è stata imposta da una superficie circolare, con raggio crescente in funzione della legge ricavata.

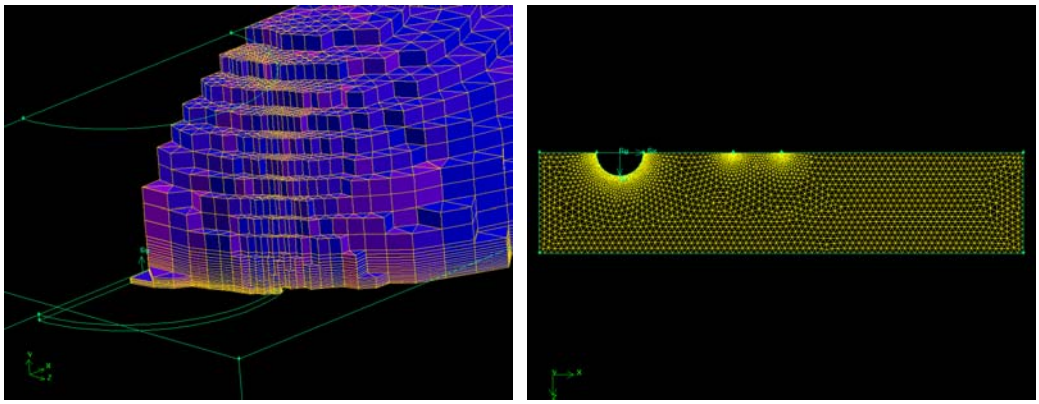

Figura 1. Particolari della griglia di calcolo ottenuta per la simulazione della prova n.3 della serie Coyote.

Per l'ingresso del vento è stata assegnata un velocità costante e pari alla velocità media del vento per l'esperimento in esame (5 [m s^{-1}]), mentre per la faccia d'uscita è stata imposta pressione costante. Alcune prove sono state condotte assegnando un profilo di vento che si adattasse alla teoria di similarità di Monon-Obukhov [12], ma non si è osservata alcuna variazione significativa nel comportamento della nuvola. In effetti, i vapori sviluppati dalla pozza si comportano come gas densi; in figura 2 è riportato l'andamento dell'intensità della turbolenza sul piano di simmetria; si vede chiaramente che, nella zona prossima al terreno, i valori più elevati di turbolenza sono fondamentalmente determinati dalla presenza del gradino.

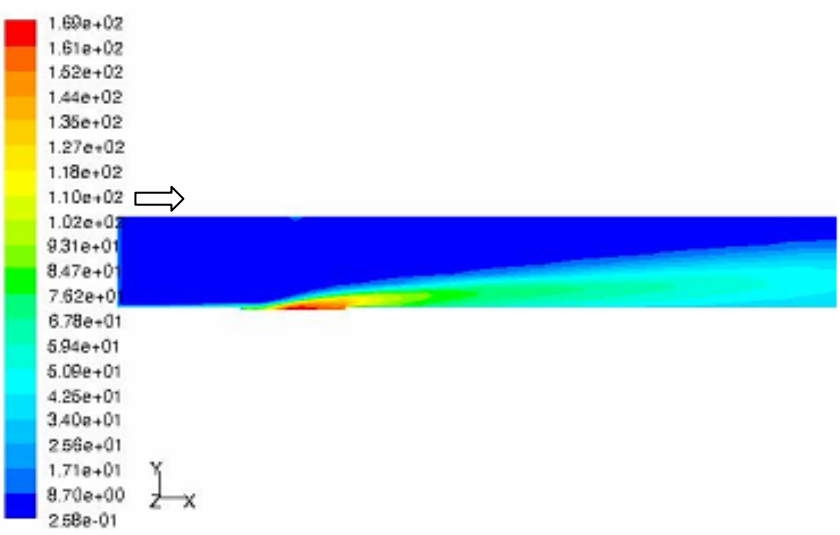

Figura 2. Andamento dell'intensità turbolenta sul piano di simmetria. La freccia indica la direzione del vento.

4.3 Risultati e confronto con i dati sperimentali

In figura 3 è riportato il confronto tra i dati sperimentali ed i risultati delle simulazioni; le curve più spesse si riferiscono alla concentrazione di GNL misurata a 140 [m] sottovento rispetto alla sorgente, a 1,5 [m] di quota; le curve più sottili si riferiscono invece alla medesima misura effettuata a 200 [m] sottovento, alla stessa altezza. Come si può notare dalla figura 3-A, le cui curve continue riportano direttamente le misurazioni fatte sul campo, i dati sperimentali sono fortemente dispersi e di non facile interpretazione.

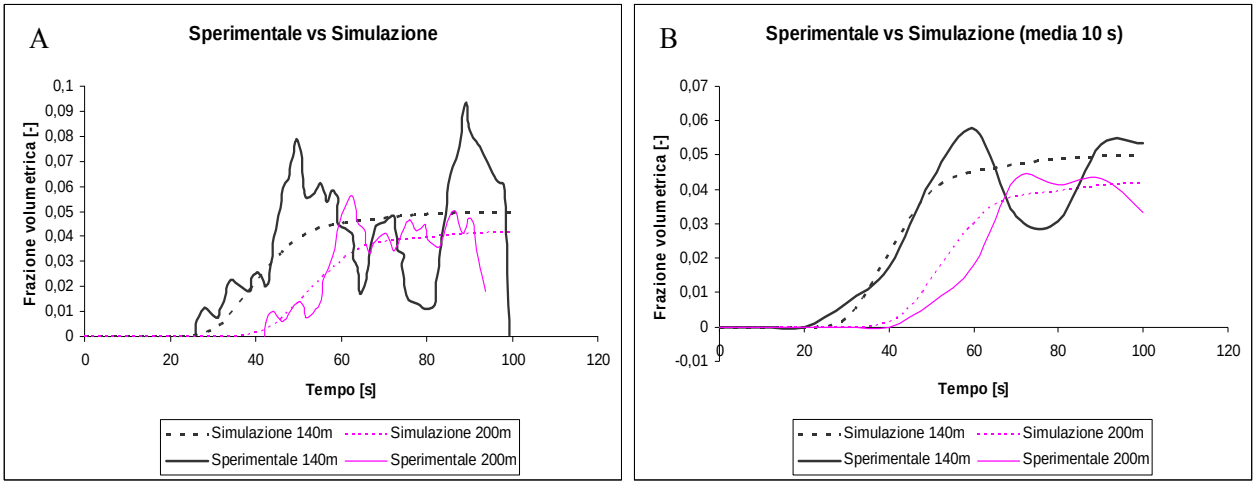

Figura 3. Andamento della concentrazione di GNL a 140 e 200 [m] dalla sorgente del rilascio.

Per operare un confronto, quindi, tali dati sono stati mediati su un tempo di 10 [s], ottenendo delle curve con un andamento più chiaro (figura 3-B). Il confronto con i risultati delle simulazioni mostra in generale un buon accordo tra dati sperimentali e concentrazioni calcolate. In particolare si può notare come il codice

CFD sia in grado di prevedere la forma della curva, con una crescita iniziale e il raggiungimento di un sostanziale regime stazionario a partire da circa 55 [s] per il punto di controllo situato a 140 [m], e 65 [s] per i 200 [m]; i dati sperimentali, così come la simulazione, si interrompono a 100 [s], istante in cui i vapori sono stati innescati per studiare la propagazione della fiamma. Buona corrispondenza si misura anche nella previsione dell'inizio della formazione della nube di vapori e nel valore raggiunto nel regime stazionario. Si può quindi affermare che lo strumento sia in grado di fornire previsioni accurate nel campo delle dispersioni ambientali di gas, a patto di fornire adeguate condizioni di bordo al problema, coerenti con la fisica dei fenomeni coinvolti.

5. GEOMETRIE COMPLESSE, CONFRONTO CODICE CFD – MODELLI INTEGRALI

5.1 Premessa

Particolarmente rilevante, nello studio di rilasci incidentali di GNL, è l'analisi delle conseguenze nell'ambito industriale. In particolare, diviene interessante il caso di rigassificatori di GNL, sia a causa della grande quantità di fluido stoccato, sia a causa della crescente diffusione di questi impianti. La configurazione geometrica di questi siti risulta estremamente complessa; occorre quindi definire una geometria che sia in grado di comprendere gli elementi unitari in una configurazione realistica e significativa, pur rimanendo nei limiti imposti dalla potenza di calcolo disponibile; in particolare le parti di impianto significative sono (figura 4):

- Pontile per l'attracco delle navi metaniere
- Pipeline per il trasporto del GNL dalle navi (in qualche caso interrata) ai serbatoi
- Serbatoi (in genere da due a quattro) per lo stoccaggio del GNL
- Gruppo di pompaggio
- Gruppo di vaporizzatori per l'immissione del GNL nella rete di distribuzione
- Altre/i apparecchiature/impianti, giacché in qualche caso questi impianti si trovano all'interno o a margine di altri siti industriali

Lo scenario considerato nel presente lavoro prevede di valutare le conseguenze di una dispersione in una configurazione d'impianto posta a distanza dal pontile sufficiente da permettere l'omissione di tale struttura e della eventuale interazione del GNL rilasciato con l'acqua di mare.

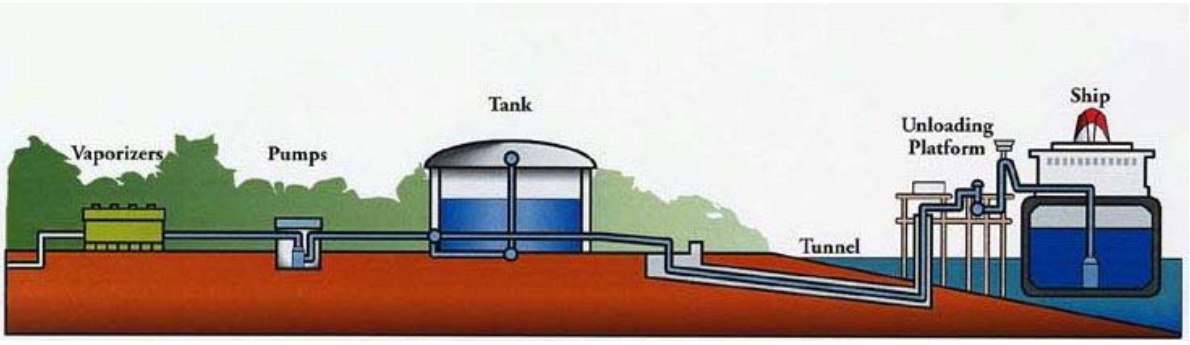

Figura 4. Schema visuale delle diverse zone di un impianto di rigassificazione.

Nel confronto dei risultati ottenuti mediante un codice CFD e con un Modello Integrale (PHAST) è importante definire la dimensione caratteristica minima degli ostacoli che sia significativa per la dispersione, in uno scenario in cui le dimensioni caratteristiche variano dalle decine di metri dei serbatoi fino al decimo di metro delle tubature. I Modelli Integrali esprimono la presenza di ostacoli tramite la rugosità superficiale (pari ad un decimo dell'altezza media dell'ostacolo); questo parametro influenza il profilo di velocità del vento e quindi la dispersione. Nei codici CFD, al contrario, ogni singolo oggetto all'interno del dominio può essere disegnato per studiarne l'influenza tridimensionale sul campo di moto. Strutture di dimensioni ridotte, tuttavia, richiedono la costruzione di una griglia di calcolo localmente molto fitta, pur influendo debolmente sul fenomeno in esame. Diviene quindi fondamentale trovare un buon compromesso tra potenza di calcolo richiesta e accuratezza della previsione.

Il termine sorgente per le simulazioni è stato valutato con PHAST; per semplificare le simulazioni e i successivi confronti, pur mantenendo il caso in esame realistico, è stata modellata l'evaporazione da una pozza di dimensioni stazionarie, pari alla media temporale delle dimensioni ottenute con PHAST. La dispersione dovuta a questo nuovo termine sorgente è stata modellata in PHAST ed i risultati sono stati

confrontati con il medesimo rilascio simulato in campo aperto con un codice CFD. Si è notato dunque che le dimensioni della nube, nel caso considerato, sono dell'ordine delle centinaia di metri di distanza al suolo e della decina di metri in altezza; di conseguenza è stato scelto di trascurare gli oggetti aventi dimensione caratteristica dell'ordine di 1 [m]; va comunque notato come questa approssimazione risulti conservativa, in quanto, come verrà illustrato in seguito, la presenza di ostacoli aumenta la turbolenza del sistema e quindi velocizza i fenomeni di dispersione turbolenta, riducendo la massima distanza raggiunta dalla nube sottovento.

5.2 Set-up delle simulazioni

In figura 5 è presentata una geometria realistica di un impianto di rigassificazione. Come già illustrato nel paragrafo precedente, la realizzazione di una griglia di calcolo per un dominio così esteso (4 [km] di lunghezza, 1 [km] di larghezza, 100 [m] di altezza), contenente ostacoli con dimensioni caratteristiche inferiori al metro (e quindi dimensioni minime di cella dell'ordine dei centimetri) avrebbe richiesto una potenza di calcolo enorme, e tempi molto lunghi, senza tuttavia fornire risultati significativamente differenti per la diffusione di una nuvola di quasi 1 [km] di lunghezza. Per questo motivo sono stati trascurati il gruppo di scambiatori, la pipeline e la torcia; inoltre si è deciso di studiare solo metà del dominio, dividendo lo scenario lungo la superficie indicata con la linea tratteggiata, ed utilizzando questa superficie come piano di simmetria del problema. Il piano di simmetria è stato scelto in modo da rispettare la reale simmetria degli elementi più influenti, la pozza e i due serbatoi più grandi; questo ha permesso, pur continuando a considerare uno scenario geometricamente realistico, di dimezzare il numero di volumi di controllo della griglia di calcolo.
Le pareti laterali e la sommità del dominio sono state caratterizzate da derivata nulla per ogni grandezza trasportata lungo la direzione normale alla faccia (condizioni di simmetria); mentre per il piano di simmetria questo serve per raddoppiare idealmente il dominio in esame, le altre superfici sono considerate sufficientemente lontane dal termine di rilascio e dagli ostacoli, da non risentire delle perturbazioni che questi provocano nel campo di moto. Nella figura 5 è indicata la faccia di ingresso del vento, caratterizzata da vento costante a 2 [m/s]; sulla faccia opposta, invece, è stata imposta una condizione di bordo di uscita, a pressione costante. Il termine sorgente è modellato con una pozza circolare a diametro costante; a questa è stato imposto un flusso convettivo di GNL, a portata variabile nel tempo; la portata è stata stimata con PHAST. Sono stati analizzati tre casi: dispersione in campo aperto (1000k celle), in presenza di ostacoli, con (1400k celle) e senza (1500k celle) un muro di contenimento, anch'esso indicato nella parte alta di figura 5.

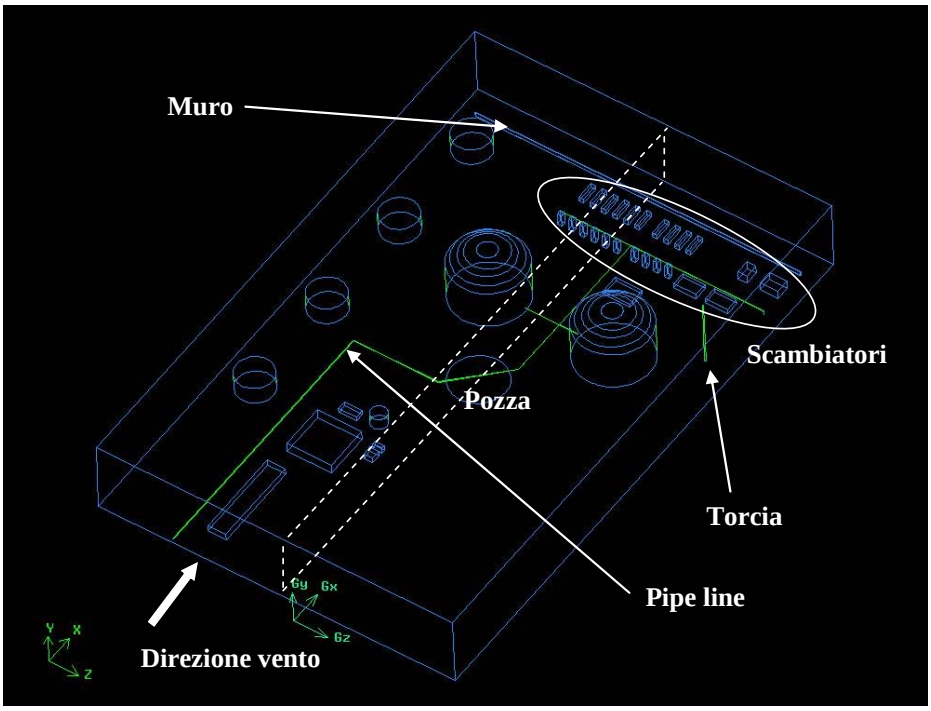

Figura 5. Geometria realistica di un impianto di rigassificazione.

5.3 Risultati

Per prima cosa è stato simulato il rilascio di metano in campo aperto; obiettivo di queste prime prove è stata la convalida dei modelli utilizzati nel codice CFD e delle condizioni di bordo impiegate per caratterizzare il problema. Il confronto è stato effettuato con i risultati di PHAST, che in campo aperto garantisce buona accuratezza nelle previsioni; in particolare, si è scelto di valutare le curve di isoconcentrazione di GNL al terreno, per un valore pari alla metà del limite inferiore di infiammabilità (LFL/2), 2,5% in volume, nell'istante di massima estensione della nube.
La figura 6 mostra i risultati della convalida; nella metà alta viene rappresentato il profilo della nuvola ottenuto con PHAST, nella parte bassa il profilo ottenuto con il codice CFD, entrambi valutati al suolo. Si può notare come esista un sostanziale accordo tra le due previsioni, con una leggera sottostima, da parte del codice CFD, sia della massima distanza raggiunta sottovento, sia dell'ampiezza della nube.

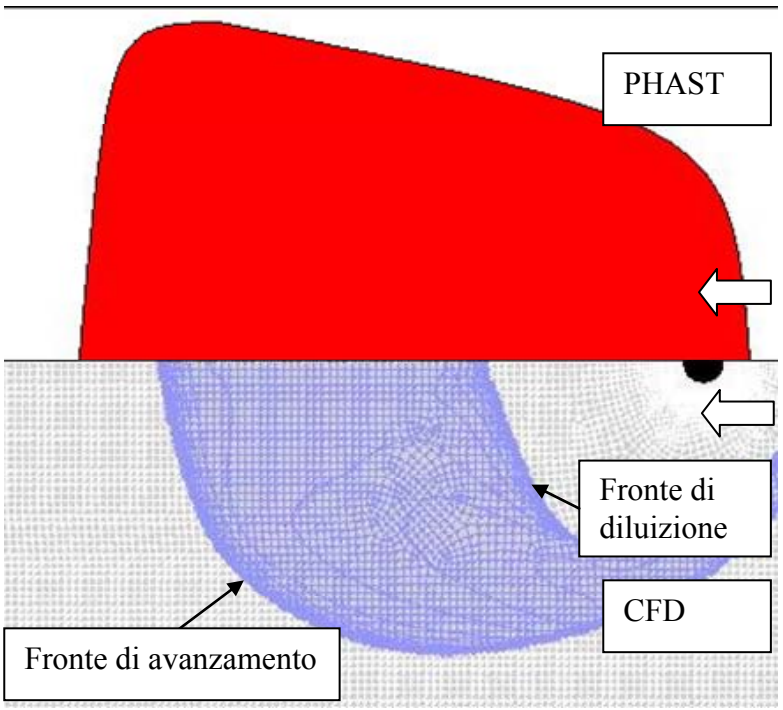

Figura 6. LFL/2 per simulazione in campo aperto; le frecce indicano la direzione del vento.

A fronte di questo piccolo scostamento, tuttavia, il codice CFD è in grado di prevedere una forma della nube ben più complessa che permette di analizzare non soltanto il fronte di avanzamento della nube, ma anche il fronte di diluizione al termine del rilascio, laddove PHAST utilizza un modello pseudo-stazionario. Per il codice CFD, è stata verificata l'indipendenza dalla griglia ripetendo la simulazione su una griglia di calcolo costituita da un numero di elementi quasi doppio ed ottenendo scostamenti dei risultati inferiori al 5%.
A seguito delle simulazioni precedenti, è stata compiuta un'analisi dell'effetto sulla dispersione della presenza di una geometria complessa, rappresentativa di un impianto di rigassificazione, in prossimità della zona di evaporazione del metano. Ciò che è possibile notare dalla figura 7 è come la distanza massima al terreno raggiunta dalla nube a concentrazione LFL/2 rispetto al caso di riferimento (campo aperto) sia fortemente ridotta, a causa dell'incremento dei fenomeni turbolenti e delle conseguenti alterazioni del campo di moto generati dalla presenza di tali ostacoli.
Inoltre è possibile notare come la presenza di ostacoli porti a fenomeni di canalizzazione della nube, creando delle direzioni preferenziali di dispersione. Infine la presenza di tali ostacoli ha effetto sull'altezza della nube stessa, la quale in prossimità degli stessi risente del campo di moto perturbato, arrivando a ricoprirli e scavalcarli.
Anche per questo caso si è provveduto ad una convalida, assicurandosi dell'indipendenza dei risultati rispetto al numero di celle, giacché particolarmente importante è il disegno e la dimensione della griglia in prossimità di pareti ed ostacoli. L'effetto visto in questo caso, anche a causa del maggior numero di celle utilizzate per la prima simulazione, è stato quello di una variazione di circa l'1% per il massimo valore di LFL/2 a fronte

di un aumento del 40% nel numero di celle e una diminuzione del 30% della dimensione massima di cella presente nel dominio.

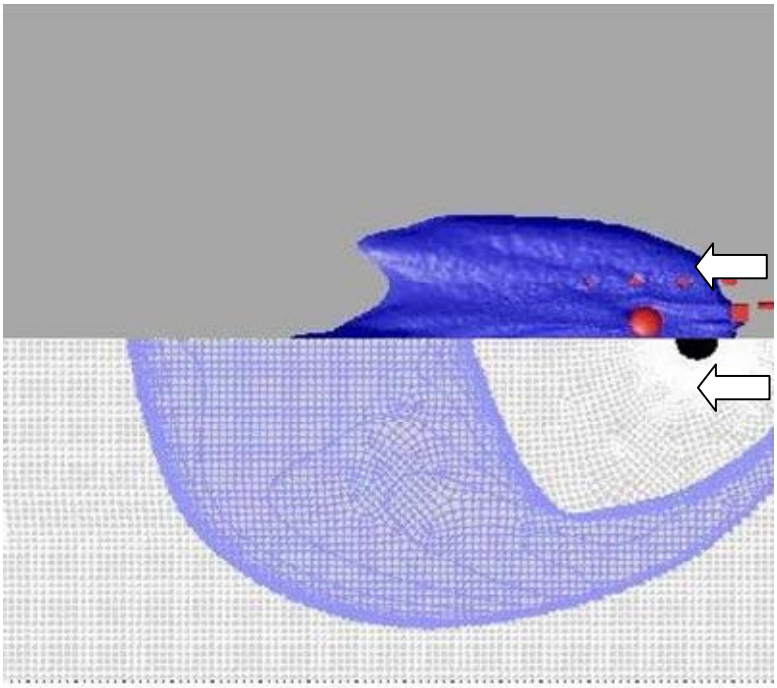

Figura 7. LFL/2 per il caso in cui sono presenti gli ostacoli (in alto), confrontato con la dispersione in campo aperto (in basso); le frecce indicano la direzione del vento.

L'ultimo studio effettuato ha considerato l'effetto che potrebbe avere un muro di contenimento posto a valle del sito industriale (come indicato in figura 5); in base all'effetto evidenziato dalla simulazione precedente, riguardante il notevole effetto degli elementi costituenti l'impianto sulla dispersione della nube di GNL, si è voluto valutare la conseguenza sulla dispersione di un lungo ostacolo posto trasversalmente rispetto alla direzione del vento, quale potrebbe essere un muro od un terrapieno. Ciò che è stato possibile notare dalla simulazione è come la nube, dopo una prima fase in cui viene contenuta dal muro e dunque subisce un effetto sul piano trasversale alla direzione del vento, riesce a scavalcare l'ostacolo e quindi pare non risentirne più. Tale effetto tuttavia, rallentando l'avanzamento del fronte della nube sottovento, ha conseguenze importanti sulla massima distanza raggiunta per LFL/2 dalla nube; infatti, rispetto al caso con sola geometria dell'impianto, la distanza di LFL/2 decresce da 960 [m] a 590 [m] circa. Per quanto riguarda l'altezza della nube si è invece notata una differenza trascurabile. Sono state effettuate anche valutazioni riguardanti l'UFL ma, in questo caso, gli effetti sono risultati più contenuti.
In tabella 6 sono riportati i risultati ottenuti in termini di massima altezza e distanza massima raggiunti dal fronte della nube con concentrazione pari alla metà del limite inferiore di infiammabilità e dal limite superiore di infiammabilità (UFL).

Tabella 6. Confronto tra le distanze ed altezze massime raggiunte dalla nuvola di GNL nei vari scenari.

Caso	n° Celle	Max distanza LFL/2 [m]	Max altezza LFL/2 [m]	Max distanza UFL [m]	Max altezza UFL [m]
PHAST	-	1639	15,5	289	5,5
Campo aperto	1000 k	1392	13,6	270	5,8
Senza muro	1400 k	960	22	263	4
Con muro	1500 k	587	22	235	4,5

6. CONCLUSIONI

Questo lavoro ha permesso di analizzare e confrontare i metodi attualmente maggiormente utilizzati per la stima del termine sorgente di rilasci di GNL; la dispersione conseguente è stata studiata con modelli integrali e con un codice di fluidodinamica computazionale. I risultati ottenuti hanno evidenziato una buona corrispondenza dei due metodi per quanto riguarda dispersioni del gas denso in campo aperto, dove PHAST e, in generale i Modelli Integrali garantiscono buone previsioni; in presenza di ostacoli, invece, il campo di moto è fortemente modificato, e la nuvola di gas modifica sensibilmente il suo comportamento. Queste informazioni suggeriscono l'importanza dell'impiego di codici di fluidodinamica per lo studio di dispersioni in ambienti geometricamente complessi, quali possono essere un impianto o un ambiente urbano, al fine di elaborare analisi di rischio affidabili ed effettuare, ad esempio, un'adeguata pianificazione delle emergenze per l'area di interesse.

RINGRAZIAMENTI

Si ringraziano DPC/CONPRICI per il supporto finanziario ricevuto.

RIFERIMENTI

[1] Bernatik, A., Libisova M., Loss prevention in heavy industry: risk assessment of large gasholders, J. Loss Prevention in the Process Industries, 17, 2004, pp. 271-278.

[2] Holt, A., Witlox H.W.M., Validation of the unified dispersion model, Technical reference manual, v. 6.0, 1999, DNV, London.

[3] Hanna, S.R., Britter, R.E, Wind flow vapour cloud dispersion at industrial and urban sites, AIChE Center for Chemical Process Safety, New York, NY, 2002.

[4] Tracking and predicting the atmospheric dispersion of hazardous material releases – Implications for homeland security, The National Academies Press, Washington, DC, 2003.

[5] Luketa-Hanlin, A., A review of large-scale LNG spills: Experiments and modelling, Journal of Hazardous Materials 140, 465-477, 2007

[6] Melhem, G.A., Saraf, S., Ozog, H., Understand LNG Rapid phase transition (RPT), ioMosaicCorporation, 2006

[7] DNV software, DISC Theory document, DNV, London 2005

[8] Shaw, P., Briscoe, F., Evaporation from spills of hazardous liquids on land and water, Safety and Reliability Direcrorate (SRD), United Kingdom Atomic Energy Authority, SRD R 100, 1978

[9] Perdikaris, G.A., Mayinger, F., Numerical simulation of heavy gas cloud dispersion within topographically complex terrain, J. Loss Prevention in the Process Industries 7, 1994, pp. 391-396.

[10] Jones, W.P., Launder, B.E., The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence, International J. Heat Mass Transfer, 15, 1972, pp. 301-314.

[11] LLNL, Coyote series data report. UCID: 19953 V.1, 2, 1983, LLNL/NWC Livermore, CA.

[12] Alinot, C., Masson, C., k-epsilon model for the Atmospheric Boundary Layer under various thermal stratifications, J. Solar Energy Engineering, 127, 2005, pp. 438-443.