

IL CODICE NEVE 2.0 PER LA VALUTAZIONE DEL TASSO DI BRUCIAMENTO DI DEFLAGRAZIONI IN AMBIENTI COMPARTIMENTATI

Lucilla Lusini, Fabio Fineschi

Università degli Studi di Pisa - Dipartimento di Ingegneria meccanica, nucleare e della produzione
Via Diotisalvi, 2 – 56126 Pisa

SOMMARIO

Lo studio delle deflagrazioni deboli di miscele gassose combustibile-aria nasce all'Università degli Studi di Pisa nell'ambito della sicurezza degli impianti nucleari a fissione, ma si è poi esteso fino a comprendere il settore industriale e quello delle abitazioni civili; è stato affrontato con un approccio semi-empirico, combinando prove e dati sperimentali con la simulazione matematica. La modellazione teorica delle deflagrazioni ha originato tra l'altro un codice, denominato NEVE, nato per valutare i tassi di bruciamento in ambienti parzialmente confinati a partire da transitori di pressione misurati durante prove sperimentali. La precedente versione 1.0 era in grado di studiare ambienti monovolumetrici, mentre l'attuale versione 2.0, ben più complessa, è in grado di simulare i diversi e complessi fenomeni che accompagnano la propagazione della deflagrazione attraverso due compartimenti comunicanti tra loro, con o senza sfiato verso l'ambiente esterno.

1. INTRODUZIONE

La ricerca sulla complessa fenomenologia delle deflagrazioni deboli in generale, e sulla sua evoluzione in ambienti compartimentati in particolare, ha avuto grande sviluppo nel campo della sicurezza nucleare, ma i suoi risultati sono agevolmente applicabili ai settori delle abitazioni civili o degli edifici industriali.

Interazioni metallo-acqua ad alta temperatura potrebbero verificarsi, sia pure con probabilità assai remota, in caso di gravissimo incidente in un reattore nucleare, generando una considerevole quantità di idrogeno che potrebbe accumularsi nel contenitore di sicurezza. Questo grande edificio a tenuta racchiude la parte dell'impianto più a contatto del reattore nucleare, svolgendo la duplice funzione di scudo, per proteggerlo dai pericoli esterni, e di barriera ultima, per impedire ogni eventuale fuga di sostanze radioattive verso l'esterno, anche nel caso che un gravissimo incidente danneggi le tre barriere che la precedono nel classico sistema di "difesa in profondità" tipico dell'ingegneria nucleare [1].

Visto che, in un qualsiasi ambiente, è impossibile escludere con certezza la presenza di sorgenti energetiche al di sotto di 0.018 mJ, che è l'energia minima di ignizione per miscele aria-idrogeno, diventa possibile la formazione di fiamme, che rapidamente potrebbero propagarsi in tutto il volume o in una parte di esso, se la concentrazione di combustibile supera il 4% in volume (limite inferiore di infiammabilità), determinando sovrapressioni e sovratemperature di cui si dovrà tener conto nella progettazione dell'edificio di contenimento. La valutazione di questi sovraccarichi, sia pure fatta in modo conservativo, deve essere sufficientemente realistica e non eccessiva, per fare le giuste scelte di sicurezza.

Una serie di sistemi di prevenzione e mitigazione permette oggi di tenere sotto controllo questo tipo di fenomeni negli impianti nucleari, escludendo quindi la possibilità di rilasci radioattivi pericolosi all'atmosfera anche in caso di incidenti gravissimi.

E' stato possibile individuare e progettare questi sistemi grazie alle conoscenze acquisite in più di venti anni di ricerche sviluppate in molti Paesi del mondo nel settore delle deflagrazioni di idrogeno, dove l'Università di Pisa ha spesso giocato un ruolo da protagonista [2, 3, 4].

Questo patrimonio è prezioso oggi che diventa urgente assicurare una gestione sicura dell'idrogeno come vettore energetico, per superare molti problemi di impatto ambientale in applicazioni civili ed industriali, ma, in questo caso, il comportamento dell'idrogeno deve essere confrontato con quello di altri tipi di combustibile e la tipologia degli ambienti dove possono originarsi miscele infiammabili diventa molto più varia, per cui va allargato ed approfondito l'archivio dei dati sperimentali e quello delle informazioni da questi ottenibili dopo attenta elaborazione ed analisi teorica. Di particolare importanza appare la comprensione di fenomeni di deflagrazione debole, propagazione di fiamma turbolenta, accelerazione turbolenta e carichi conseguenti alla presenza di compartimenti multipli e di ostacoli al passaggio della fiamma.

E' allora auspicabile che sorgano molti apparati sperimentali di piccole e medie dimensioni per lo studio di esplosioni di idrogeno ed altri gas combustibili, al fine di confrontare dati sperimentali e validare modelli matematici di simulazione, indispensabili per poter risolvere il problema che ancor oggi si presenta come il

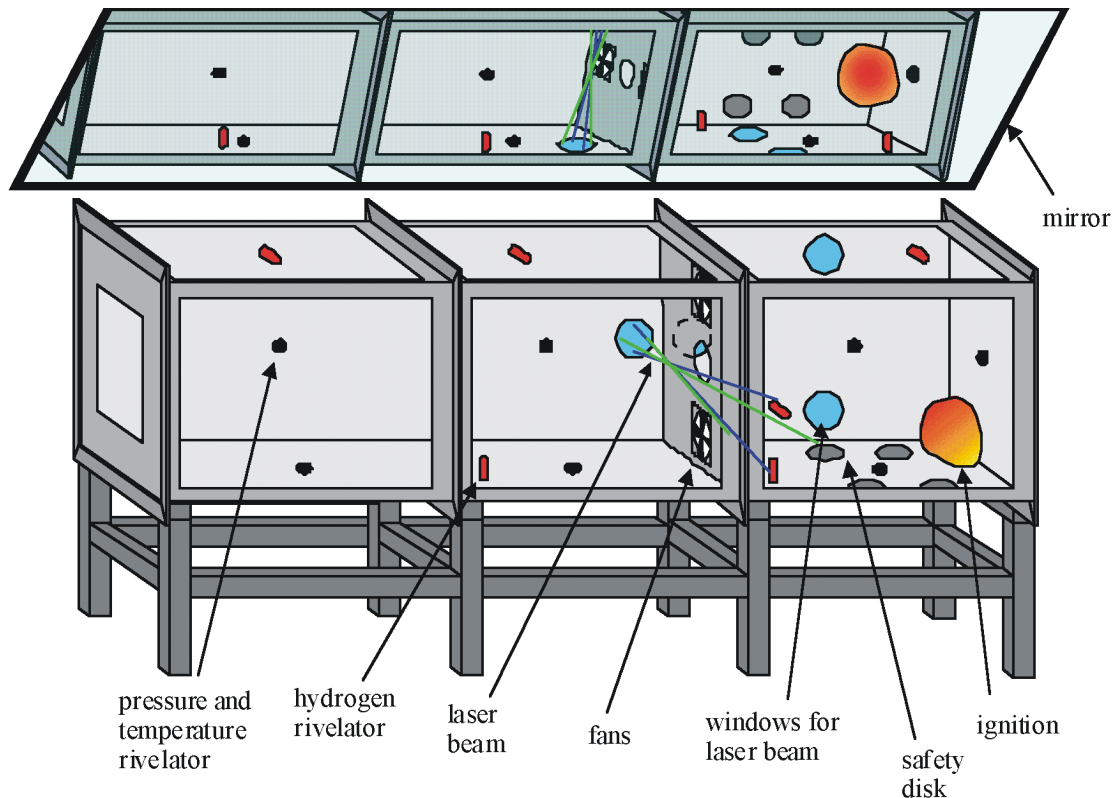


Fig. 1 - Apparecchiatura sperimentale LargeView

più difficile: la valutazione degli effetti “scala” e “forma”, che permetterebbe la previsione realistica dei carichi da deflagrazione in ogni tipo di geometria.

A questo scopo, l'Università di Pisa ha costruito ed usato alcune apparecchiature presso il laboratorio Scalbtraio del Dipartimento di Ingegneria meccanica, nucleare e della produzione. Quella che attualmente è la più sofisticata fra di esse è denominata LargeView.

2. L'APPARATO SPERIMENTALE LARGEVIEW

L'apparecchiatura sperimentale LargeView (Fig. 1) consiste di un contenitore con struttura in acciaio rinforzato di dimensioni 0.68x0.68x3.2 m e con due pareti (quella frontale e quella superiore) fatte di pannelli di vetro multi-stratificato. In questo modo la propagazione della fiamma può essere seguita visivamente e registrata attraverso una telecamera ad alta precisione. Uno specchio inclinato, posto sulla sommità dell'apparecchiatura, permette di riprendere l'immagine vista da sopra simultaneamente a quella frontale. Grazie alla preventiva immissione di un aerosol di NaCl, è possibile visualizzare anche la fiamma di idrogeno, altrimenti invisibile.

Il volume è suddiviso in due camere da un setto con foro centrale; nella prima camera è stato posto l'ignitore a scintilla, per cui è da lì che inizia la combustione, la seconda camera ha uno sfiato verso l'esterno.

Per una descrizione più dettagliata si rimanda alla bibliografia specifica [5].

L'immissione dell'idrogeno (o altro gas combustibile), controllata a portata costante da un flussimetro, è effettuata per il tempo necessario a raggiungere la voluta concentrazione volumetrica in aria. Un apparato di ventilazione miscela i gas e un sistema di rivelatori consente di verificare l'omogeneità della concentrazione nelle due camere.

Una serie di trasduttori di pressione effettua il monitoraggio delle sovrappressioni in vari punti nel contenitore durante la deflagrazione ed invia i segnali ad un PC, dove vengono memorizzati. L'analisi quantitativa è possibile sui dati di pressione dei listati di output dei trasduttori, che opportunamente depurati dal rumore, sono riportati al reale tempo di transitorio, scandito dalla frequenza di registrazione della telecamera (25 fotogrammi/s). I valori di pressione nelle due camere vengono così associati ai fenomeni peculiari che sono stati osservati visivamente durante l'esplosione.

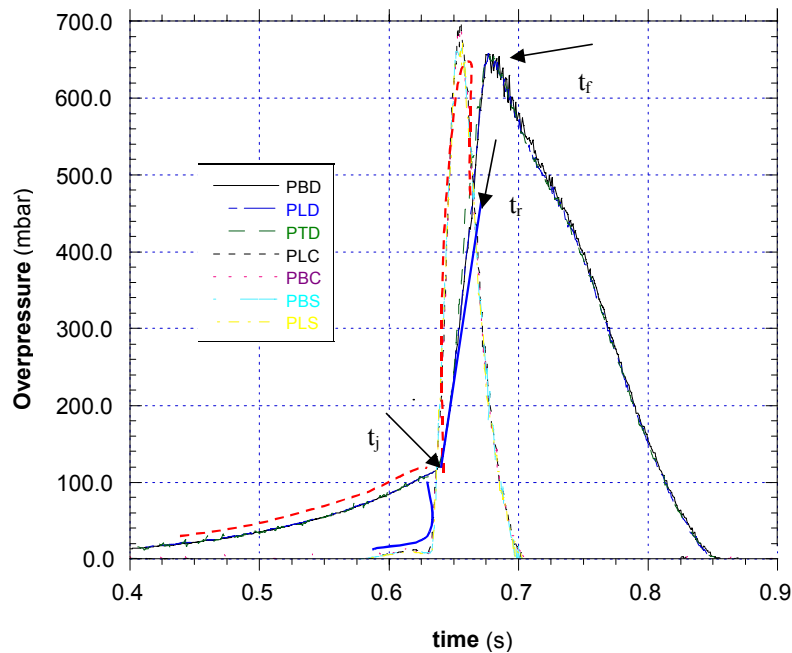


Fig. 2 - Transitorio di pressione di deflagrazione di miscela al 9.5 vol.% di H₂ in aria

Nell'apparecchiatura così predisposta sono stati eseguiti centinaia di test di deflagrazione sia con idrogeno che con metano [6, 7, 8].

3. FENOMENOLOGIA DELLA DEFLAGRAZIONE IN LARGEVIEW

La pressione durante deflagrazioni di miscele gassose in contenitori chiusi di geometria sferica o quasi, con pochi setti ed ostacoli interni, cresce nel tempo con legge cubica fino a raggiungere un valor massimo e decadere lentamente con lo smaltimento del calore. La presenza di turbolenza e/o di geometria interna complessa provoca accelerazioni di fiamma con ratei di crescita della pressione maggiori della legge cubica.

Per limitare la pressione, si può dotare il contenitore di uno sfiato che si apre non appena la pressione di esplosione supera un valore di progetto (*venting*). Nell'apparecchiatura LargeView, di cui la figura 2 riporta i transitori di sovrappressione forniti in una prova di deflagrazione di idrogeno dai trasduttori collocati nelle due camere comunicanti, lo sfiato si apre per una sovrappressione molto piccola, in pratica appena la combustione ha inizio.

In generale, con l'accensione nel punto basso della prima camera, la fiamma ha inizialmente una forma sferica, poi per le forze di galleggiamento si innalza, spingendo in avanti il gas incombusto. Via via che questo esce dall'orifizio verso la seconda camera, la fiamma accelera, rincorrendolo.

La fiamma raggiunge la seconda camera quando ancora la combustione nella prima non è terminata. Immediatamente per l'idrogeno, o con un certo ritardo per il metano, ha luogo un'ignizione a jet del gas incombusto presente nella seconda camera, dovuta alla rapida miscelazione con il gas combusto molto caldo uscente dalla prima camera. La *jet-ignition* provoca un rapidissimo bruciamento, come se molti ignitori entrassero contemporaneamente in funzione in punti diversi nella seconda camera. In corrispondenza del suo verificarsi, t_j , si osserva in figura 2 la repentina crescita di pressione nella seconda camera, P_2 (curva con picco a sinistra).

Tale sovrappressione ostacola subito lo sfiato dalla prima alla seconda camera, fino a causare un'inversione del flusso nell'orifizio di comunicazione (rinculo = *recoil*), con jet ignition del gas rimasto ancora incombusto nella prima camera. In conseguenza, la pressione nella prima camera, P_1 (curva con picco a destra), cresce mentre P_2 già decresce, raggiungendo un valore massimo che può essere, a seconda della concentrazione dell'idrogeno e della superficie dell'orifizio, anche molto maggiore del valore massimo raggiunto nella seconda camera.

Quando l'orifizio di comunicazione tra le due camere è troppo piccolo, non si ha ignizione nella seconda camera: il gas combusto infatti si raffredda talmente, mescolandosi troppo rapidamente con il gas incombusto, che non riesce ad incendiarlo.

Se nella prima camera rimane gas incombusto, quando già la combustione è stata completata nella seconda camera, una fiamma stazionaria parte dall'orifizio per allungarsi nella seconda camera, alimentata dallo sfiato simultaneo di gas combusto ed incombusto dalla prima camera e, perciò, questo fenomeno è stato chiamato "fiamma ossidrica" (*oxyhydrogen torch phenomenon*). Durante questa fase la sovrappressione è praticamente nulla, azzerata dallo sfiato verso l'ambiente esterno.

I tre fenomeni sono stati descritti qui molto succintamente solo per far meglio capire le difficoltà di simulazione che il codice NEVE 2.0 deve affrontare e si rimanda per maggiori dettagli alla bibliografia [5].

In conclusione, l'analisi combinata delle immagini e degli output di pressione permettono di identificare quattro fasi temporali che si succedono nel transitorio di deflagrazione. Nell'ordine: prima combustione nella prima camera, jet-ignition nella seconda camera, recoil nella prima camera, combustione finale. Alcune di queste fasi possono mancare per particolari condizioni iniziali del test: tipo e concentrazione chimica del gas combustibile nella miscela infiammabile, posizione dell'ignitore, dimensioni e collocazione dell'orifizio di comunicazione tra le due camere.

4. CODICE NEVE E LIMITAZIONI DELLA VERSIONE 1.0

Il codice NEVE [5, 9] vuole valutare i tassi di bruciamento volumetrici di deflagrazioni deboli sperimentali effettuate in un volume parzialmente confinato. La conoscenza sperimentale del tasso di bruciamento, permette, usando "all'inverso" lo stesso regolo termodinamico di NEVE (per esempio, con il codice VEDEG [10]) o ricorrendo ad altro codice (per esempio MSC/DYTRAN appositamente modificato [11]) di prevedere il transitorio di pressione in situazioni incidentali approssimativamente simili alle condizioni sperimentali in cui il tasso di bruciamento è valutato. Possono così essere possibili analisi di rischio e impatto ambientale, la progettazione di sistemi di sfiato per abbattere le sovrappressioni di deflagrazione in ambienti chiusi o la progettazione di sistemi di ignizione deliberata per impedire il raggiungimento di concentrazioni di combustibile pericolose, in caso di esplosione, per l'integrità dei sistemi di contenimento.

Il modello termodinamico del codice descrive la propagazione di fiamma nel tempo in una miscela infiammabile di composizione uniforme che occupa un volume comunicante con l'esterno, distinguendo le due fasi chimiche, combusta ed incombusta, separate dal fronte di fiamma. Assume la combustione isobara del singolo elemento di massa, cioè suppone che la pressione a cavallo del fronte di fiamma sia la stessa nelle due fasi (ipotesi tipica delle deflagrazioni deboli). Tutti gli altri parametri termodinamici sono differenti nelle due condizioni di gas bruciato e gas incombusto, ma uniformi all'interno di ciascuna fase.

Il processo è adiabatico e i principali dati in ingresso sono:

- transitorio di pressione interna o, in alternativa, transitorio della frazione di volume occupata dal gas combusto stimato sulla base delle osservazioni e delle misure effettuate manualmente sui fotogrammi forniti della telecamera (purtroppo solo nella prima combustione in prima camera la fiamma si propaga in modo sufficientemente lento da potersi chiaramente distinguere nei fotogrammi il fronte di separazione tra gas combusto e incombusto)
- transitorio di pressione esterna
- area di sfiato combusto ed incombusto

I principali dati in uscita sono:

- transitorio temporale del tasso volumetrico di bruciamento e, quindi, anche la velocità di bruciamento se è possibile stimare l'area di fiamma dai fotogrammi forniti della telecamera
- transitorio della frazione di volume occupata dal gas combusto (o, in alternativa, quando possibile, il transitorio di pressione), che può essere confrontato con gli equivalenti dati sperimentali, quando siano reperibili dall'esame dei fotogrammi, per validare il modello.

Il modello della versione 1.0 [12], scritta in linguaggio FORTRAN 77, prevede che l'eventuale sfiato avvenga sempre verso l'esterno (la pressione interna non è mai inferiore a quella esterna), per cui si presta solo allo studio del fenomeno in volumi monocompartimentati o durante la fase iniziale della combustione nella prima camera di un ambiente multicompartimentato.

5. MODELLO TERMODINAMICO DEL CODICE NEVE 2.0

Il modello termodinamico alla base di NEVE 2.0 è in grado di interpretare la deflagrazione in ciascun volume di un contenitore multicompartimentato, per cui, per esempio, rende possibile studiare la deflagrazione nell'apparecchiatura LargeView in ogni sua fase, sia nel primo che nel secondo compartimento, sia quando le aree di sfiato sono due che quando è una sola, sia quando la pressione nel compartimento è inferiore che quando è superiore alla pressione negli ambienti adiacenti.

In particolare, permette la stima del rateo di bruciamento volumetrico B_r qualsiasi sia la camera dove avviene la combustione, risolvendo il sistema di equazioni differenziali derivante dai bilanci di massa ed energia descritti nel seguito, avendo per input i transitori sperimentali di pressione nella prima camera e nella seconda camera. Per interpretare le varie fasi della deflagrazione in una delle due camere, è sufficiente cambiare di volta in volta le condizioni iniziali e al contorno imposte alle equazioni, utilizzando le osservazioni e le misure sperimentali o i dati calcolati in precedenti "run" del codice.

5.1 Generico sfiato da un compartimento

$$dn_v = \frac{1}{M_v} dm_v = C_D A_v \frac{P_v}{RT_v} c_v \bar{\eta}_{\text{eff}} dt = \frac{P_v}{RT_v} B_v dt \quad (1)$$

dove, essendo $\bar{\eta} = \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{1}{\gamma}} \left\{ \frac{2}{\gamma-1} \left[1 - \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}$ per $p_2 < p_1 < p_{cr} = p_2 \left(\frac{\gamma+1}{2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}$

o $\bar{\eta} = \left(\frac{2}{\gamma+1} \right)^{\frac{1}{2} \frac{\gamma+1}{\gamma-1}}$ per $p_2 < p_1 \geq p_{cr}$, si possono avere due condizioni:

- condizione A ($P > P_e$): $\bar{\eta}_{\text{eff}} = +\bar{\eta}$, con $p_1 = P$ e $p_2 = P_e$, $T_v = T$, $P_v = P$, $c_v = c(T)$
- condizione B ($P < P_e$): $\bar{\eta}_{\text{eff}} = -\bar{\eta}$, con $p_1 = P_e$ e $p_2 = P$, $T_v = T_e$, $P_v = P_e$, $c_v = c_e(T_e)$

A_{vo} è l'area di sfiato tra la prima e la seconda camera, A_{vs} è quella di sfiato tra la seconda camera e l'esterno. Nella prima camera, B_{vs} è nullo.

Si suppone che lo sfiato attraverso l'area A_v possa essere o solo di gas incombusto o solo di gas combusto; se attraverso un orifizio si ha l'uscita contemporanea delle due fasi gassose, va definita l'area di deflusso dell'una e dell'altra.

5.2 Bilanci di massa

Incombusto

$$dn_u = -dn_{uv} - dn_{ur}$$

dove $n_u = \frac{PV(1-x)}{RT_u}$ e $dn_{ur} = \frac{P}{RT_u} B_r dt$, per cui

$$dn_u = -\frac{V}{RT_u} P dx + \frac{(1-x)V}{RT_u} dP - \frac{(1-x)VP}{RT_u} \frac{dT_u}{T_u} = -\left(\frac{P_{vo}}{RT_{uvo}} B_{uvo} + \frac{P_{vs}}{RT_{uvs}} B_{uvs} \right) dt - \frac{P}{RT_u} B_r dt$$

Semplificando e adimensionalizzando:

$$(1-x) \left(\frac{d\bar{P}}{\bar{P}} - \frac{d\bar{T}_u}{\bar{T}_u} \right) - dx = -(U_{m1} + U_{m2}) d\bar{t} = -U_m d\bar{t} \quad (2)$$

dove $U_{m1} = \frac{\bar{T}_u}{\bar{P}} \left(\frac{\bar{P}_{vo} \bar{B}_{uvo}}{\bar{T}_{uvo}} + \frac{\bar{P}_{vs} \bar{B}_{uvs}}{\bar{T}_{uvs}} \right)$ e $U_{m2} = \bar{B}_r$

Fiamma

$$dn_{br} = (1 + \epsilon v) dn_{ur} = \frac{M_u}{M_b} dn_{ur}$$

Combusto

$$dn_b = dn_{br} - dn_{bv}$$

$$x \left(\frac{d\bar{P}}{\bar{P}} - \frac{d\bar{T}_b}{\bar{T}_b} \right) + dx = (B_{m1} - B_{m2}) d\bar{t} = B_m d\bar{t} \quad (3)$$

con $B_{m1} = \frac{M_u}{M_b} \frac{\bar{T}_b}{\bar{T}_u} \bar{B}_r$ e $B_{m2} = \frac{\bar{T}_b}{\bar{P}} \left(\frac{\bar{P}_{vo} \bar{B}_{bvo}}{\bar{T}_{bvo}} + \frac{\bar{P}_{vs} \bar{B}_{bvs}}{\bar{T}_{bvs}} \right)$

5.3 Bilanci di energia

Dal primo principio della termodinamica in un sistema aperto in cui siano trascurabili le variazioni di energia cinetica e potenziale fra ingresso e uscita:

$$d(nu)_{\text{sistema}} + (h dn)_{\text{uscita}} - (h dn)_{\text{ingresso}} = \delta Q - \delta W$$

NEVE ipotizza che la rapidità della deflagrazione permetta di considerare nel transitorio l'apparecchiatura LargeView adiabatica: $\delta Q = 0$.

Incombusto

Sviluppando i differenziali con l'ipotesi di gas perfetto e sfruttando le equazioni di bilancio di massa:

$$n_u du_u + u_u dn_u + h_{uvo} dn_{uvo} + h_{uvs} dn_{uvs} + h_u dn_{ur} = -PdV_u$$

$$\begin{aligned} \frac{(1-x)PV}{RT_u} C_{vu} dT_u + h_u (-dn_{uvo} - dn_{uvs} - dn_{ur}) - RT_u dn_u + h_{uvo} dn_{uvo} + h_{uvs} dn_{uvs} + h_u dn_{ur} &= -PdV_u \\ \frac{(1-x)PV}{RT_u} C_{vu} dT_u + PVdx - (1-x)VdP + (1-x)VP \frac{dT_u}{T_u} - (h_u - h_{uvo})dn_{uvo} - (h_u - h_{uvs})dn_{uvs} &= PVdx \\ \frac{(1-x)PV}{RT_u} C_{vu} dT_u - (1-x)VdP + (1-x)VP \frac{dT_u}{T_u} &= \left[(h_u - h_{uvo}) \frac{P_{vo} VB_{uvo}}{RT_{uvo}} + (h_u - h_{uvs}) \frac{P_{vs} VB_{uvs}}{RT_{uvs}} \right] dt \\ (1-x) \left(\frac{\gamma_u}{\gamma_u - 1} \frac{d\bar{T}_u}{\bar{T}_u} - \frac{d\bar{P}}{\bar{P}} \right) &= U_e d\bar{t} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\text{con } U_e = \left(\frac{\bar{I}_u - \bar{I}_{uvo}}{\bar{T}_{uvo}} \frac{\bar{P}_{vo}}{\bar{P}} \bar{B}_{uvo} + \frac{\bar{I}_u - \bar{I}_{uvs}}{\bar{T}_{uvs}} \frac{\bar{P}_{vs}}{\bar{P}} \bar{B}_{uvs} \right)$$

Quando la pressione del compartimento è maggiore di quelle negli ambienti adiacenti, $U_e = 0$ e l'equazione è quella della compressione isentropica.

Fiamma

Trasformazione adiabatica e isobara: $dH = 0$ (isentropica)

$$\frac{M_u}{M_b} (\bar{I}_{bf} - \bar{I}_{bs}) - (\bar{I}_u - \bar{I}_{us}) + \varepsilon \Delta \bar{h}_s = 0$$

per cui $\bar{I}_{bf} = \bar{I}_{bs} + \frac{M_b}{M_u} [(\bar{I}_u - \bar{I}_{us}) - \varepsilon \Delta \bar{h}_s]$, da cui si definisce la temperatura di fiamma, T_f .

Combusto

$$\begin{aligned} d(nu)_b + h_{bvo} dn_{bvo} + h_{bvs} dn_{bvs} - h_{bf} dn_{br} &= -PdV_b \\ n_b du_b + (h_b - RT_b) dn_b + h_{bvo} dn_{bvo} + h_{bvs} dn_{bvs} - h_{bf} dn_{br} &= -PdV_b \\ \frac{PVx}{RT_b} C_{vb} dT_b + (h_b - h_{bf}) dn_{br} + (h_{bvo} - h_b) dn_{bvo} + (h_{bvs} - h_b) dn_{bvs} - RT_b dn_b &= -PVdx \\ \frac{PVx}{RT_b} C_{vb} dT_b - RT_b \left[\frac{V}{RT_b} \left(Pdx + x dP - xP \frac{dT_b}{T_b} \right) \right] + PVdx &= - \left(\frac{\bar{I}_b - \bar{I}_{bf}}{\bar{T}_u} \frac{M_u}{M_b} PV\bar{B}_f + \frac{\bar{I}_{bvo} - \bar{I}_b}{\bar{T}_{bvo}} P_{vo} V\bar{B}_{bvo} + \frac{\bar{I}_{bvs} - \bar{I}_b}{\bar{T}_{bvs}} P_{vs} V\bar{B}_{bvs} \right) d\bar{t} \\ - \left(x \frac{C_{vb}}{R} \frac{dT_b}{T_b} - x \frac{dP}{P} + x \frac{dT_b}{T_b} \right) &= \left(\frac{\frac{M_u}{M_b} (\bar{I}_b - \bar{I}_{bs}) + (\bar{I}_u - \bar{I}_{us}) - \varepsilon \Delta \bar{h}_s}{\bar{T}_u} \bar{B}_f + \frac{\bar{I}_{bvo} - \bar{I}_b}{\bar{T}_{bvo}} \frac{\bar{P}_{vo}}{\bar{P}} \bar{B}_{bvo} + \frac{\bar{I}_{bvs} - \bar{I}_b}{\bar{T}_{bvs}} \frac{\bar{P}_{vs}}{\bar{P}} \bar{B}_{bvs} \right) d\bar{t} \\ x \left(\frac{d\bar{P}}{\bar{P}} - \frac{\gamma_b}{\gamma_b - 1} \frac{d\bar{T}_b}{\bar{T}_b} \right) &= B_e d\bar{t} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\text{con } B_e = \left(\frac{\frac{M_u}{M_b} (\bar{I}_b - \bar{I}_{bs}) + (\bar{I}_u - \bar{I}_{us}) - \varepsilon \Delta \bar{h}_s}{\bar{T}_u} \bar{B}_r + \frac{\bar{I}_{bvo} - \bar{I}_b}{\bar{T}_{bvo}} \frac{\bar{P}_{vo}}{\bar{P}} \bar{B}_{bvo} + \frac{\bar{I}_{bvs} - \bar{I}_b}{\bar{T}_{bvs}} \frac{\bar{P}_{vs}}{\bar{P}} \bar{B}_{bvs} \right)$$

5.4 Risoluzione del sistema di equazioni

Si hanno i seguenti dati ed incognite:

dati: $P, P_{eo}, P_{es}, T_{ueo}, T_{beo}, T_{ues}, T_{bes}$ e le loro derivate, tutti dedotti dalle osservazioni sperimentali.

4 incognite: x, T_u, T_b, B_r 4 equazioni: (2), (3), (4), (5).

Dalle (4) e (5) si ricavano $\frac{d\bar{T}_u}{dt}$ (6) e $\frac{d\bar{T}_b}{dt}$ (7) in funzione di una sola derivata: $\frac{d\bar{P}}{dt}$. Sommando la (2) e

la (3), per eliminare $\frac{dx}{dt}$, e sostituendo nell'equazione ottenuta (8) le espressioni (6) e (7), si trova una

relazione (9) che lega B_r alla sola derivata $\frac{d\bar{P}}{dt}$. Sostituendo la (6) nella (2) o la (7) nella (3) si ottiene $\frac{dx}{dt}$

(10) in funzione della sola derivata $\frac{d\bar{P}}{dt}$.

Si può ora risolvere il sistema di equazioni differenziali (6), (7), (10), dove i termini che dipendono da B_r sono ricavati attraverso la (9) e quelli che dipendono dai B_v attraverso la (1).

Per poter descrivere tutto il transitorio di deflagrazione, NEVE 2.0 deve essere applicato alle varie fasi della deflagrazione nelle due camere nella giusta successione:

1. Prima fase nella prima camera ($P_1 > P_2$)
2. *Jet-ignition* e prima fase nella seconda camera ($P_1 > P_2$)
3. Seconda fase nella seconda camera ($P_2 > P_1$)
4. Seconda fase nella prima camera: *recoil* ($P_2 > P_1$)

Il modello interpreta la fase di *recoil*, ovvero l'ingresso di gas nella prima camera di LargeView dalla seconda camera, dopo che lì è avvenuta una rapida pressurizzazione provocata dalla *jet-ignition*. Equazioni e condizioni iniziali sono impostate coerentemente con le seguenti ipotesi:

- Nella prima camera all'istante iniziale di *recoil* sono già presenti entrambi le fasi, incombusta e combusta, separate dalla superficie di fiamma, dove sta proseguendo la combustione, con tasso di bruciamento iniziale uguale a quello finale della prima fase della deflagrazione nella prima camera, quando la pressione nella seconda camera non aveva ancora superato quella della prima (transitorio che era già possibile analizzare con la prima versione di NEVE)
 - In accordo con l'osservazione visiva dei fotogrammi registrati durante l'esperienza, solo gas combusto entra dalla seconda camera, che si miscela immediatamente con quello già presente nel 1° compartimento: $B_{uvs} = B_{bvs} = B_{uvo} = 0$ e condizione B nella (1). Il fenomeno si svolge in simultanea alla seconda fase di deflagrazione nella seconda camera, da dove lo sfianto avviene verso due ambienti a pressioni minori, ma il modello di interpretazione del recoil può usufruire dei risultati (in particolare la variazione nel tempo della temperatura del gas combusto che proviene dalla seconda camera) che è già stato possibile calcolare da NEVE 2 nell'analisi di questa fase
5. Terza fase nella prima camera ($P_1 > P_2$)
 6. Terza fase nella seconda camera ($P_1 > P_2$)
 7. La quarta fase, *oxyhydrogen torch phenomenon*, non è presa attualmente in considerazione, perché le sovrappressioni generate risultano sperimentalmente essere del tutto trascurabili

6. STRUTTURA DEL CODICE NEVE 2.0

Il pacchetto NEVE 2.0, implementato in MatLAB, consta del programma principale chiamato 'MAIN', costituito dal file main.m, nel quale vengono eseguiti i comandi fondamentali, e di un programma parallelo chiamato 'EQUAZ', file equaz.m, nel quale viene riportato il sistema di equazioni differenziali da integrare, tratto dal modello termodinamico prima descritto. In formato file.m deve essere fornito anche il file con i dati di input che ha struttura di matrice variabile secondo il tipo di transitorio che si vuol rappresentare: prima o seconda camera, fase 1, o 2, o 3.

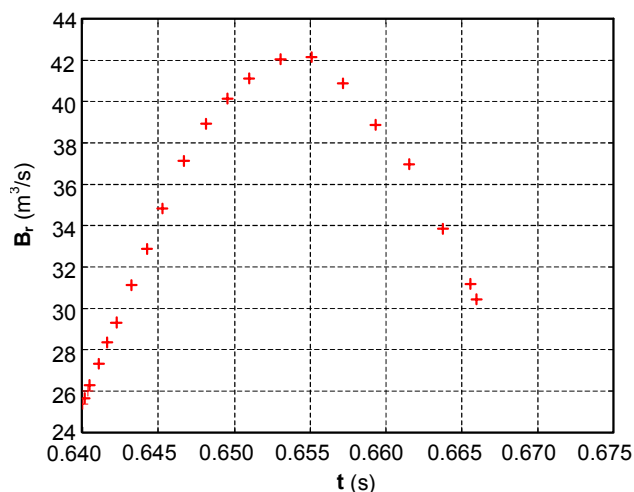


Fig. 3 - Tasso di bruciamento volumetrico durante recoil con H₂ al 10%, calcolato con NEVE 2.0

Sono presenti inoltre anche le funzioni che permettono di calcolare i calori specifici a pressione costante e le entalpie delle fasi combusta ed incombusta al variare della temperatura.

Nel programma MAIN vengono eseguite le seguenti operazioni:

- Assegnazione delle grandezze variabili globali interne ed esterne comuni a tutti i programmi del pacchetto NEVE 2.0
- Assegnazione delle condizioni al contorno del transitorio, tipo di vent, area di vent, ecc., assegnazione delle costanti di adimensionalizzazione delle grandezze fondamentali
- Inizializzazione delle variabili fondamentali del sistema di equazioni di NEVE 2.0
- Acquisizione dei transitori di pressioni interna ed esterna e delle temperature esterne alla camera oggetto di studio nella fase indagata, tramite caricamento sul workspace di MatLAB del file di input
- Assegnazione del valore al flag 'camera2' (0 se il transitorio è riferito alla prima camera)
- In seguito al valore assegnato al flag si preparano i valori di inizializzazione dello sfiato verso l'atmosfera dalla seconda camera, se questa è oggetto del transitorio in esame
- Chiamata ed inizializzazione del sistema di equazioni differenziali 'EQUAZ'
- Attivazione del solutore di equazioni differenziali, 'ODE15s.m', con assegnazione della matrice di errore assoluto tollerato, del vettore dei tempi, delle condizioni iniziali
- Segue una parte in cui vengono ricalcolate le variabili interne presenti nel sistema di equazioni differenziali del modello, al fine di estrarne con grafici o tabelle i valori durante il transitorio esaminato
- Infine, sono date istruzioni di plottatura delle grandezze interessanti (tra cui sicuramente B_r, tasso volumetrico di bruciamento) e di archiviazione dei valori delle variabili interne ed esterne, caricate o calcolate, che si vuole ricaricare sul workspace di MatLAB anche senza far girare di nuovo il programma

Per il momento NEVE 2.0 considera solo deflagrazioni idrogeno-aria.

7. APPLICAZIONE DI NEVE 2.0 A UN TRANSITORIO DI RECOIL

In figura 3 sono riportati i risultati di un calcolo fatto con NEVE 2.0 per un transitorio di 'recoil', ovvero di fase 2 in prima camera, dovuto a un rientro di gas combusto nella prima camera a causa della sovrappressione raggiunta nel compartimento adiacente. Questo fenomeno è considerato la causa ultima del picco di pressione finale nella prima camera.

Si riporta questo esempio proprio perché NEVE 1.0 non permette di studiare transitori di questo tipo.

Le costanti di sfiato sono poste a valori tali che il programma considera l'efflusso come proveniente dalla seconda camera ed entrante nel compartimento. Occorre dare in input, per il calcolo dell'efflusso, i valori di temperatura di miscela combusta ed incombusta della camera adiacente, calcolati precedentemente

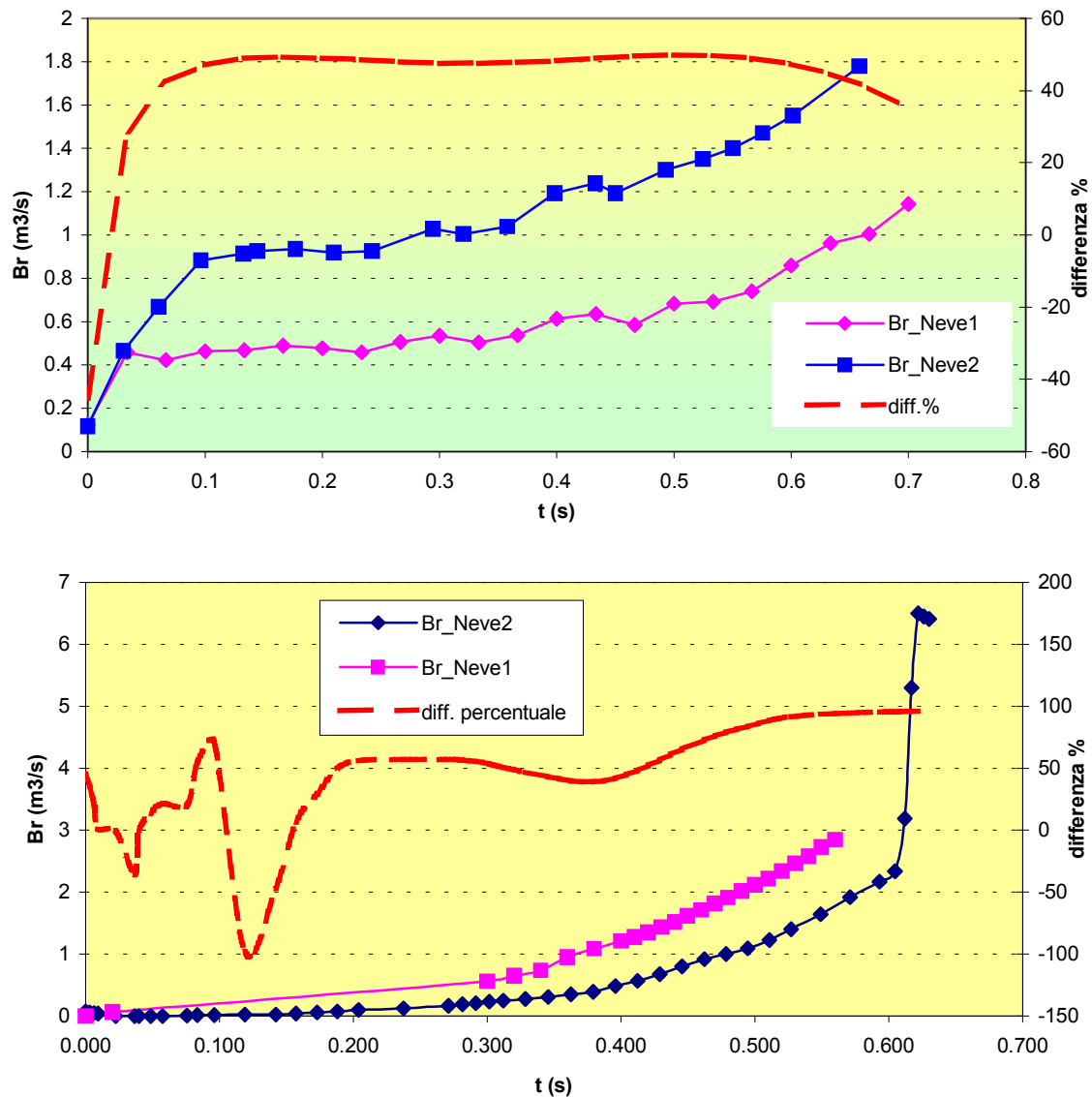


Fig 4 - Confronto del tasso di bruciamento nella prima fase della combustione nella prima camera tra NEVE 1.0 e NEVE 2.0, per un test con H_2 al 9% (sopra) e 10% (sotto) in volume

nell'applicazione di NEVE 2.0 alla stessa fase ma nella camera 2, con efflusso dipendente solo dai valori interni alla camera 2 stessa.

Una volta composto il file di input, vengono inizializzate le variabili principali interne alla camera impiegando i valori di temperatura delle due miscele di gas, tasso di bruciamento calcolati nella fase immediatamente precedente sempre nella camera 1.

Come si può osservare, il transitorio di recoil dà luogo ad un picco del tasso volumetrico di bruciamento dovuto al getto di gas caldi entranti.

8. CONFRONTO TRA DATI CALCOLATI DA NEVE 1.0 E 2.0

Il tasso di bruciamento calcolato dal codice non può essere validato rispetto a misure sperimentali poiché in condizioni di deflagrazione è impossibile misurarlo (è proprio per stimarlo che è stato inventato NEVE!).

NEVE 1.0 era stato già validato con successo per la prima combustione in prima camera con miscele idrogeno-aria, calcolando la variazione di volume bruciato nel tempo e comparandola con i valori desunti dall'analisi dei fotogrammi. Si sono allora voluti confrontare i risultati ottenuti da NEVE 1.0 e 2.0 proprio per questa fase della deflagrazione, per rendersi conto delle differenze che si potevano registrare tra i due

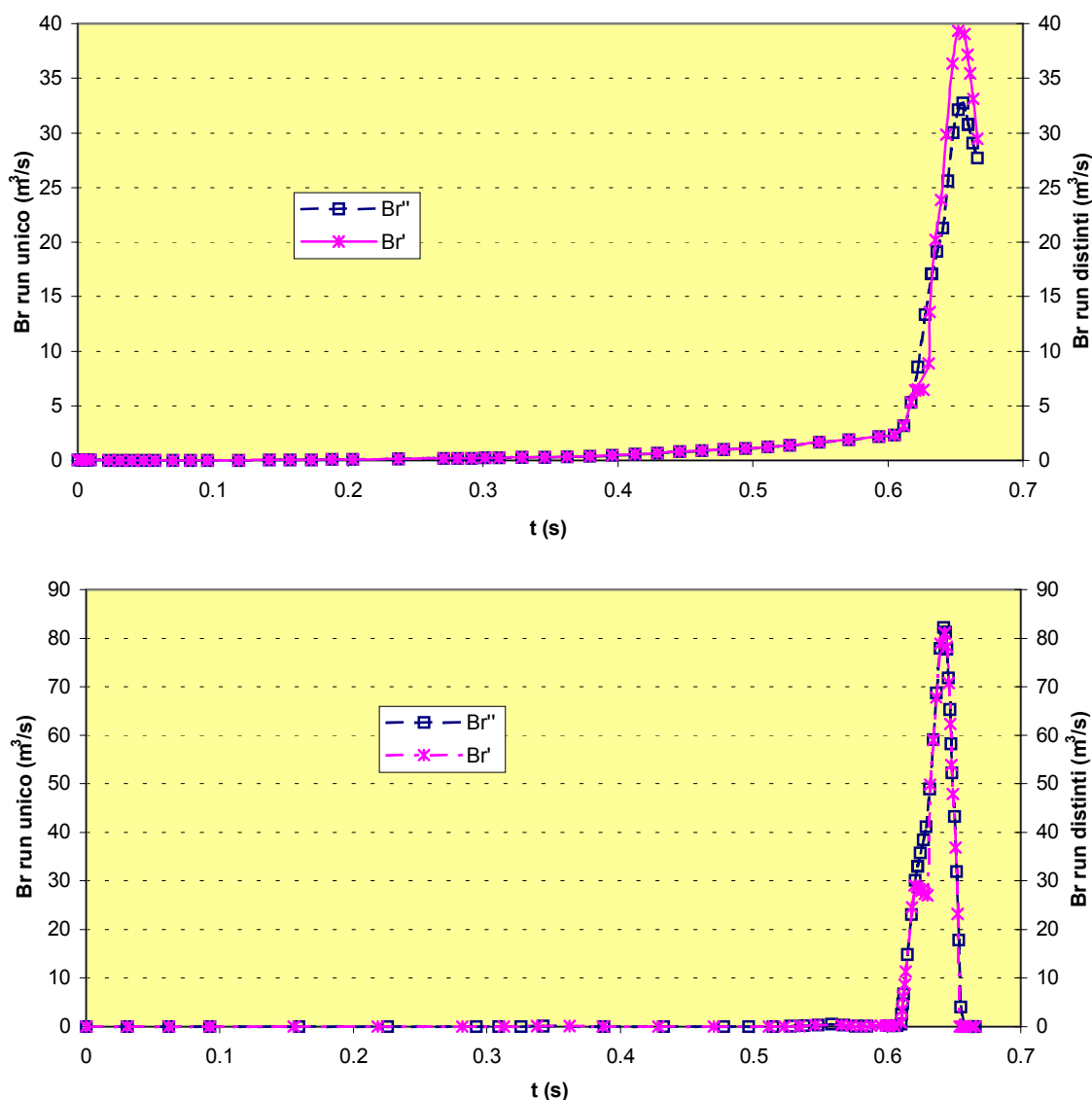


Fig. 5 – Confronto tra run unico e run distinti di NEVE 2.0 in prima (sopra) e seconda (sotto) camera

codici, identici come modello termodinamico per volumi con sfiato verso l'esterno. Nel futuro si intende estendere il confronto anche alla fase di jet-ignition in seconda camera, l'altra fase a cui si può ancora applicare NEVE 1.0, ma per la quale, come già detto, non sono desumibili dati sperimentali sul volume occupato dai gas combusti.

Sono stati dati in input ai due codici i transitori di pressione di prima e seconda camera e sono stati confrontati i risultanti transitori di tasso volumetrico di bruciamento (Fig. 4). Per eseguire una comparazione percentuale, i profili sono stati ricostruiti con funzioni continue di interpolazione per la durata temporale del transitorio stesso. Le differenze non appaiono insignificanti, per cui si è deciso di fare in futuro più approfondite verifiche sia sulla scrittura dei programmi di calcolo, sia sulle tecniche di integrazione usate.

9. CONFRONTO TRA DIVERSE PROCEDURE DI CALCOLO CON NEVE 2.0

Per saggiare la sensibilità del programma NEVE 2.0, è stato eseguito il confronto tra valutazioni del tasso volumetrico di bruciamento ottenute simulando il transitorio, in ciascuna camera, con *run* distinti per le fasi successive (prima combustione – jet ignition – recoil) o con un unico run. Dette rispettivamente Br' e Br'' le due valutazioni, si riscontra qualche differenza solo in punti singolari come il picco di prima camera e il flesso per la seconda camera (Fig. 5). Sono già programmati ulteriori esami.

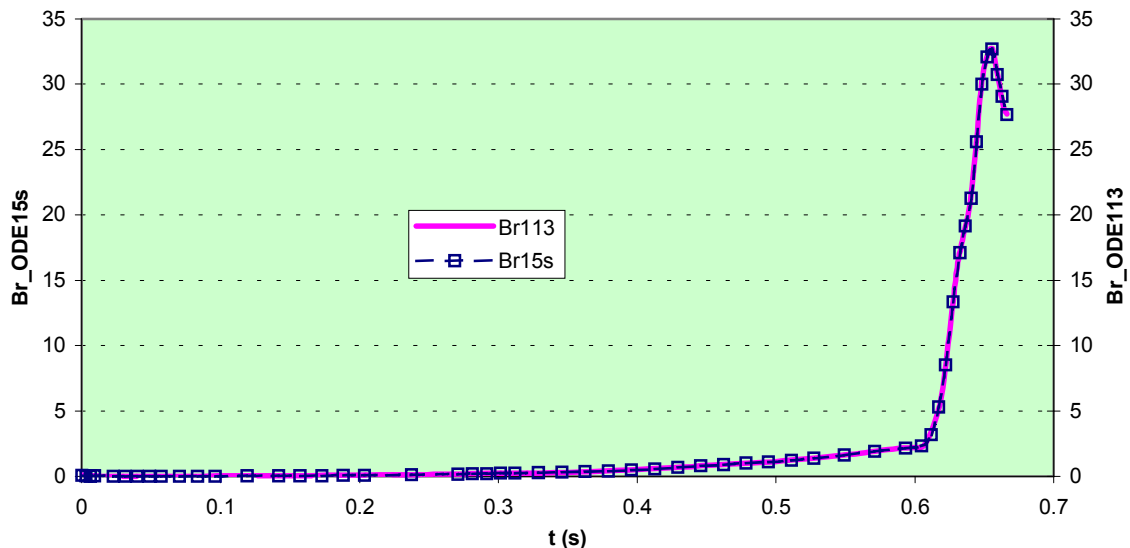


Fig 6 - Prima combustione in prima camera: confronto tra solutori ODE15s e ODE113 di NEVE 2.0

Infine, come ultima analisi di sensibilità, è stato effettuato il confronto tra differenti metodi di risoluzione del sistema di equazioni differenziali: tra i numerosi solutori che offre MatLAB si è convenuto di sceglierne due che impiegano metodi 'multistep' di integrazione di sistemi di equazioni ordinarie stiff e non. I solutori messi a confronto sono detti ODE113 e ODE15s (Ordinary Differential Equation solver).

ODE 113 è un solutore del tipo Adams-Bashforth-Moulton, multistep, ODE15s è il solutore usato di default in NEVE 2.0 e impiega le formule di differenziazione numerica (NDFs) e opzionalmente le formule di differenziazione backward, similmente al solutore (LSODE) presente in NEVE 1.0.

Il risultato del confronto è una soddisfacente identità di risultati, come illustrato nel grafico di figura 6, per il transitorio di prima combustione in prima camera.

10. CONCLUSIONI

Le deflagrazioni deboli sono uno dei fenomeni più rischiosi collegati alla presenza di idrogeno, in quanto la loro evoluzione è difficile da prevedere e, quindi, anche da prevenire e mitigare, in geometrie complesse, come all'interno di un edificio civile o industriale, anche se brillanti risultati si sono già ottenuti per i sistemi di contenimento dei grandi reattori nucleari di potenza.

A conferma di ciò, per mezzo dei test sperimentali eseguiti con idrogeno nell'apparecchiatura LargeView, si è potuto constatare che anche solo una semplice compartimentazione bicamera, comporta una variabilità di sovrapressioni e di fenomeni esplosivi. Infatti l'analisi statistica dei transitori di pressione è molto dispersa anche per test eseguiti in condizioni sperimentali *nominali* uguali. Il fenomeno della turbolenza, misurato con il Laser Doppler Anemometer, riesce solo in parte a spiegare questa variabilità dei carichi sulle strutture, che sembra invece dovuta piuttosto alla successione di fenomeni legati alla compartimentazione, che con una serie di retroazioni positive tendono ad esaltare le differenze tra gli effetti provocate dalle differenze impercettibili che ci possono essere nelle iniziali condizioni sperimentali.

Preso atto della complessità introdotta nella esplosione dalla compartimentazione, si sono analizzate le deflagrazioni sperimentali effettuate in LargeView scomponendole in fasi successive, per stimare la variazione nel tempo del tasso di bruciamento, a partire dai dati ottenuti dalle misure di pressione effettuate nei compartimenti, con l'ausilio di un modello termodinamico applicato più volte in successione alle due camere. Il modello è stato implementato nel codice NEVE 2.0 in ambiente MatLAB e permette di risolvere i bilanci di massa ed energia anche con ipotesi di flusso di gas combusto ed incombusto entrante nel compartimento, a differenza del precedente codice NEVE 1.0 in linguaggio FORTRAN.

A conclusione della modellazione matematica, il codice NEVE 2.0 è stato impiegato per analizzare dei transitori completi a concentrazione diversa.

Come futuri sviluppi del piano di ricerca possono individuarsi i seguenti argomenti:

- Verifica ulteriore dell'influenza sui risultati del calcolo delle procedure di traduzione del modello matematico in linguaggio di programmazione e delle modalità di integrazione del sistema di equazioni differenziali
- Proseguimento dell'analisi dei test LargeView con il codice NEVE 2.0 per valutare i tassi di bruciamento nelle varie condizioni sperimentali
- Estensione e, ove possibile, validazione del codice NEVE (1) per tipi diversi di miscela gassosa infiammabile e non solo per miscele idrogeno-aria, (2) per contenitori con più di due compartimenti
- Indagine su possibili coefficienti di influenza geometrici sull'andamento del tasso volumetrico di bruciamento, per incominciare a tracciare una strada per prevedere gli effetti scala intercorrenti tra apparecchiature di laboratorio e grandi edifici civili ed industriali
- Inversione del codice NEVE 2.0 per la valutazione dei transitori di pressione in contenitori compartimentati a partire dalla conoscenza del tasso di bruciamento

ELENCO DEI SIMBOLI

A_v	= area di venting (sfiato)
B	= tasso volumetrico di gas
C_D	= coefficiente di resistenza allo sfiato
c	= velocità del suono = $\sqrt{\frac{\gamma RT}{M}}$
C_p	= calore specifico molare a pressione costante
C_v	= calore specifico molare a volume costante
E_0	= energia di ignizione
h	= entalpia molare
I_x	= $\int^{T_x} C_p dt$
M	= peso molecolare
n	= numero di moli
P	= pressione
Q	= calore
R	= costante dei gas
t	= tempo
T	= temperatura
u	= energia interna molare
U	= tasso di riduzione volumetrica del gas incombusto
V	= volume recipiente (se esente da indici, altrimenti indica la quantità "volume")
W	= lavoro
x	= frazione di volume combusto
Δh	= variazione di entalpia in una combustione a temperatura costante in cui le moli, dei reagenti e dei prodotti, coinvolte nel processo sono uguali ai coefficienti stechiometrici della reazione
ϵ	= rapporto fra la frazione molare del reagente in difetto nel gas incombusto e il corrispondente coefficiente stechiometrico della reazione considerata
η	= fattore di pressione nella correlazione della portata di venting
γ	= rapporto fra i calori specifici molari della miscela di gas a pressione e a volume costante
v	= differenza fra la somma dei coefficienti stechiometrici dei prodotti e quella dei reagenti nella reazione considerata

Indici

0	= condizioni iniziali
b	= gas combusto
vb	= gas combusto ventato
cr	= condizione critica di venting
e	= (esterno) compartimento adiacente
f	= fiamma [o reagente in difetto (solo nelle note)]
H	= reagente
j	= jet-ignition
o	= vent tra prima e seconda camera

r = reazione o recoil
 s = condizioni standard e/o vent finale seconda camera-esterno recipiente
 u = gas incombusto
 vu = gas incombusto ventato
 v = venting (sfiato)

BIBLIOGRAFIA

- [1] F. Fineschi, "Defense in Depth against the Hydrogen Risk - A European Research Program", *Nuclear Safety*, Vol. 35, No. 2, USA, July-December (1994) pp. 235-245.
- [2] F. Fineschi, "Progress Made in the Area of Hydrogen Behaviour", Proceedings of the FISA-95 Symposium - EU research on severe accidents, Luxembourg, 20-22 November 1995, Ed. G. Van Goethem et alii, EUR 16896EN, (1996), pp. 305-329.
- [3] F. Fineschi, "Hydrogen related problems", in Final Report of the Reinforced Concerted Action on Reactor Safety (1990-94), Report of the European Commission, EUR 17126 EN, Luxembourg (1996), pp. 69-131.
- [4] F. Fineschi, G. Koroll, and J. Rohde, *Mitigation of hydrogen hazards in water cooled power reactors*, IAEA-TECDOC-1196, ISSN 1011-4289, pp. 41, IAEA Vienna (2001).
- [5] F. Fineschi, M. Carcassi, F. Carpina, "Experiments of weak deflagration in a multi-compartment container", Proc. 4th World Conference on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Vol. 2 - Brussels, June 2-6, Pisa (1997), pp. 755-764.
- [6] F. Fineschi, "Loading on Partition Walls due to Hydrogen Deflagration - Tests in a Multi-Compartment Small Scale Containment", in S. Bhandari (ED.), "Severe Accidents and Topics in the NESC Project", PVP-Vol.362, American Society of Mechanical Engineers, New York, USA, ISBN 0-7918-1858-6 (1998), presented at the ASME Pressure Vessel and Piping Conference, San Diego, CA, USA, July 26-30 (1998), pp. 3-10.
- [7] F. Fineschi, M.N. Carcassi, L. Lusini, F. Pilo, "Amplification of the Maximum Overpressure of Hydrogen Deflagration in Multi-compartment Containments", Proc. of the 11th Int. Heat Transfer Conference, August 23-28 (1998), Kyongju, Korea, IHTC Vol. 7, ED. J.S.Lee, Korean Society of Mechanical Engineers, Seoul, Korea, ISBN 1-56032-797-9 (1998) pp. 275-282.
- [8] M.N. Carcassi, F. Fineschi, "Combustion Behavior of H₂/air and CH₄/air mixtures at low concentrations", Proc. UNESCO Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems, Dubrovnik, Croatia, June 2-7, File 086.pdf, Publisher: Energetika Marketing, Zagreb, Croatia, ISBN 953-6759-16-0 (2002) p. 101.
- [9] F. Fineschi, M. Bazzichi, M. Carcassi, "A Study on the Hydrogen Recombination Rates of Catalytic Recombiners and Deliberate Ignition", *Nuclear Engineering and Design* 166, Amsterdam (1996), pp. 481-494.
- [10] G. Fiore, F. Fineschi, "Criteri di pericolosità per deflagrazioni di gas in ambienti confinati", Atti del Convegno Nazionale VGR2k su Valutazione e Gestione del Rischio negli Insediamenti Civili ed Industriali, Pisa, 24-26 ottobre 2000, editi su CD a cura di M. Carcassi e M. Leonardi come Atti del Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Nucleare e della Produzione dell'Università di Pisa, DIMNP 027 (2000).
- [11] F. Fineschi, D. Aquaro, M. Bazzichi, F. Pagnotta, "Simulation of Gas Deflagration in Multi-compartment Environments with an Ad-Hoc Version of a Commercial Code", *Int. Journal of Heat and Technology*, vol. 15, n.1, Pisa (1997), pp. 77-88.
- [12] M.N. Carcassi and F. Fineschi: "A theoretical and experimental study on the hydrogen vented deflagration", *Nuclear Engineering and Design*, 145, Amsterdam (1993), pp. 355-364.