

CODICI CFD NELL'ANALISI DI CONSEGUENZE DI EVENTI INCIDENTALI

M. D'Amico, S. Ditali

Snamprogetti S.p.A - Servizio Salute, Sicurezza, Ambiente e Qualità (HSEQ)
V.le De Gasperi, 16 – 20097 San Donato Milanese (MI)

SOMMARIO

I recenti sviluppi della simulazione numerica, uniti alla ampia disponibilità di potenti strumenti di calcolo, hanno reso possibile l'utilizzo di metodi di calcolo avanzati anche nell'ambito delle analisi di sicurezza degli impianti di processo. In particolare, in questi ultimi anni, si è consolidata l'applicazione dei cosiddetti codici di simulazione fluidodinamica (CFD) allo studio delle conseguenze associate al verificarsi di eventi incidentali. Ciò ha permesso un'analisi dettagliata dei fenomeni legati al rilascio di sostanze pericolose, relativamente all'evoluzione temporale dell'evento ed alla sua interazione con l'ambiente circostante, al fine di prevedere più realisticamente gli effetti conseguenti e predisporre misure di protezione/emergenza ottimali. In questa memoria sono mostrati i risultati dell'applicazione di due codici CFD ad alcuni casi esempio che rappresentano situazioni incidentali di particolare rilevanza pratica e di interesse dal punto di vista della sicurezza: il primo esempio si riferisce alla simulazione della dispersione in atmosfera di un gas freddo rilasciato da un "vent", il secondo all'incendio di un fluido in una stanza ed il terzo all'esplosione di una miscela infiammabile in un ambiente semiconfinato. Le considerazioni finali relative ai casi analizzati evidenziano le potenzialità di questi codici nello studio di scenari incidentali reali ed in quelle situazioni particolarmente complesse dove i modelli di simulazione meno accurati presentano evidenti limiti di applicabilità e/o necessitano di drastiche assunzioni semplificative.

1. INTRODUZIONE

La valutazione dei rischi associati ad operazioni in impianti che trattano sostanze pericolose rappresenta una attività di estrema importanza per il raggiungimento di un elevato livello di sicurezza. La necessità di avere una conoscenza sempre più dettagliata e sufficientemente realistica dell'evoluzione temporale di un determinato fenomeno fisico (non stazionarietà delle condizioni di rilascio e atmosferiche, interazione con ostacoli eterogenei, reazioni chimiche e generazione di onde d'urto) impone l'utilizzo di metodologie di analisi sofisticate che necessariamente richiedono modelli di simulazione e tecniche risolutive avanzate insieme alla conoscenza di un elevato numero di parametri fisici necessari alla descrizione del problema.

Gli sviluppi raggiunti nella velocità di calcolo e la ricerca di base effettuata nell'ultimo decennio hanno reso possibile rappresentare direttamente i processi fisici fondamentali che regolano i fenomeni connessi al rilascio accidentale di sostanze pericolose e/o di energia. Questo approccio è molto promettente e viene realizzato mediante la simulazione fluidodinamica (**Computational Fluid Dynamics**) che consente una stima più accurata degli effetti/danni prodotti e quindi fornisce le informazioni necessarie sia all'analista di sicurezza che al progettista degli impianti.

Si può sostanzialmente affermare che un codice di calcolo fluidodinamico (CFD) consiste in un insieme di moduli integrati (routines), utilizzati per generare griglie numeriche e risolvere le equazioni fondamentali di bilancio di massa, quantità di moto ed energia che governano il fenomeno da studiare. L'aspetto peculiare di questo approccio sta nella possibilità di utilizzare modelli quanto più dettagliati per rappresentare i meccanismi che regolano il flusso turbolento, la chimica della combustione, la formazione di "soot" ed il trasferimento di calore radiante; comunque, nonostante le notevoli potenzialità raggiunte dagli attuali computer, non è ancora possibile simulare direttamente tutti i processi fisici coinvolti nell'evoluzione di un dato fenomeno a causa delle ampie variazioni di scala sia temporale che spaziale su cui questi si sviluppano. Per tale motivo è

necessario ricorrere a descrizioni matematiche approssimate (tramite opportuni modelli) di quegli aspetti che avvengono su brevi e/o piccole scale, i quali non sono normalmente risolti all'interno della griglia di calcolo dalla maggior parte dei codici fluidodinamici. Tra questi, il modello sicuramente più noto è quello " κ - ε ", utilizzato per descrivere il moto turbolento all'equilibrio, cioè quando produzione e distruzione della turbolenza si bilanciano. In pratica, essendo presenti nelle equazioni di conservazione di Navier-Stokes le due nuove variabili, l'energia cinetica turbolenta (κ) e la sua velocità di dissipazione (ε), questo modello di turbolenza permette la chiusura del sistema con l'aggiunta di due nuove equazioni di bilancio, una per κ e l'altra per ε .

Vengono mostrate, nel corso della presente memoria, le parti salienti di alcune applicazioni effettuate con due codici fluidodinamici (KFX-99 e SPL-EXPSIM) utilizzati all'interno del dipartimento Salute, Sicurezza, Ambiente e Qualità (HSEQ) della Snamprogetti.

2. CARATTERISTICHE DEI CODICI CFD UTILIZZATI

Il primo codice, KFX-99, che rappresenta l'evoluzione [1] dell'originale Kameleon sviluppato dalla SINTEF nel 1986, è un codice adatto alla simulazione del campo di moto non stazionario per fluidi comprimibili e incomprimibili in geometria tridimensionale (3-D). Risolve le equazioni di conservazione discretizzate ai volumi finiti, lungo una griglia strutturata cartesiana ortogonale. Il codice KFX-99 è basato su un algoritmo risolutivo di tipo implicito con l'adozione di un approccio iterativo alle soluzioni. I principali sottomodelli presenti nel codice sono: modello di turbolenza " κ - ε " per fluidi viscosi anche in presenza di bassi numeri di Reynolds, modello di combustione "Eddy Dissipation Model", adatto alla trattazione della combustione in presenza di un campo di moto turbolento, modello "Eddy Dissipation Soot" per la valutazione della formazione di particolato da incendio ed il "Discrete Transfer Model" per la trattazione della propagazione della radiazione termica. Una nuova versione del codice (KFX-2002) verrà rilasciata entro l'anno corrente come risultato di un'attività di sviluppo svolta dalla società norvegese ComputIT a seguito dell'applicazione e validazione effettuata negli ultimi anni da un gruppo di lavoro composto da esperti provenienti da importanti società operanti nei settori petrolchimico ed energetico, quali Gruppo ENI (attraverso le sue società e divisioni principali: Snamprogetti, Enitecnologie e ENI/Agip), Gaz de France, Norsk-Hydro, Phillips, Statoil e TotalFinaElf.

Il secondo codice, SPL-EXPSIM [2], che è stato sviluppato internamente alla Snamprogetti (nel 1990/91), simula il fenomeno della esplosione di gas in ambienti, aventi geometrie 2-D, semi-confinati e con ostacoli, nel corso della quale si generano e si propagano, anche all'esterno della zona interessata dalla combustione, pericolose onde d'urto. Anche questo codice utilizza una griglia strutturata cartesiana ortogonale sulla quale le equazioni del campo di moto e dei relativi sottomodelli sono discretizzate ai volumi finiti. Per la trattazione delle discontinuità associate all'onda d'urto, le soluzioni numeriche sono ottenute con uno schema esplicito, il "Flux Corrected Transport". In relazione ai sottomodelli utilizzati, la turbolenza viene trattata sempre con il modello " κ - ε ", mentre per la combustione è presente il modello "Eddy Break-Up" in cui la velocità di combustione dipende dal grado di miscelamento del combustibile. Tale codice viene estensivamente utilizzato in ambito off-shore ed è stato anche raffrontato con i risultati di esperimenti in scala reale, nel corso di un benchmark internazionale avente lo scopo di determinare l'accuratezza di differenti codici CFD per l'analisi delle esplosioni [6].

3. APPLICAZIONI A SCENARI DI INTERESSE

Il primo scenario preso in esame è relativo alla applicazione di KFX-99 alla dispersione di un gas freddo, metano, rilasciato da un vent in condizioni di calma di vento (velocità del vento pari a 0.1 m/s). Questa situazione potrebbe verificarsi durante lo scarico di emergenza da una cosiddetta "candela fredda" di un impianto che tratta GNL. Considerando una temperatura del metano all'emissione in atmosfera pari a 144 K, in figura 1 sono mostrate le curve di isoconcentrazione verticale ottenute dalla simulazione numerica con KFX-99; queste riproducono fedelmente quelle ricavate da Nedelka & Dubost, nella pubblicazione di riferimento [3], ove si evidenziava una ricaduta al suolo della nube infiammabile (involucro con concentrazione pari al 5% vol.) nelle vicinanze della base dello stack.

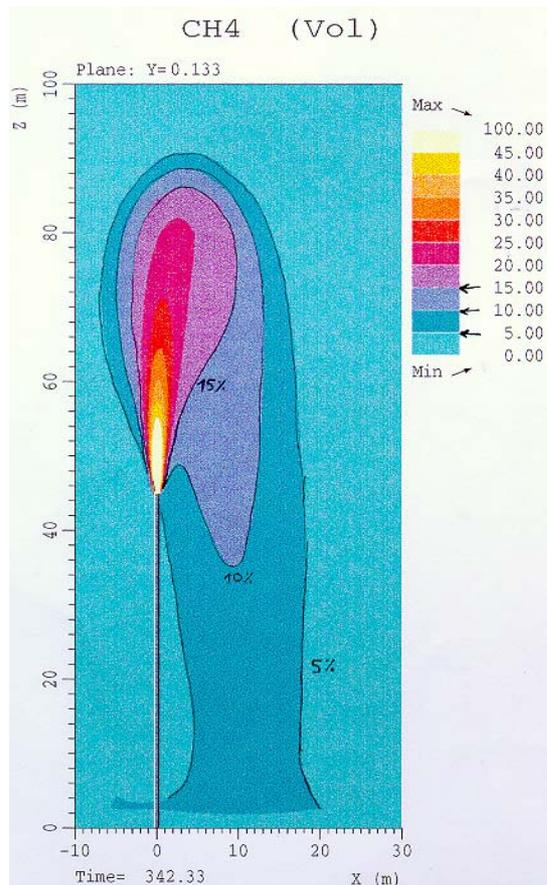


Figura 1 – Valori di isoconcentrazioni proiettati su un piano verticale (ottenuti con KFX-99)

Situazione quest'ultima pericolosa e non prevedibile con codici di calcolo basati su modelli semplificati per l'analisi di dispersione in quanto la caratteristica di gas freddo, avente densità maggiore di quella dell'aria, e la contemporanea condizione di assenza di vento non permettono la corretta applicazione né dei modelli di dispersione passiva (cosiddetti Gaussiani) - in cui la diluizione è dovuta solamente alla turbolenza atmosferica - né dei più avanzati modelli integrali (come quello proposto da Ooms [7]) che adottano profili di similarità e relazioni semi-empiriche per l'entrainment di aria. I primi, infatti, sono validi per rilasci di gas neutri (o leggeri) e velocità del vento superiori a 0.5 m/s, mentre le relazioni di "entrainment" utilizzate nei secondi non sono accurate vicino all'emissione, dove si registrano condizioni estreme di bassa temperatura ed elevata densità che inibiscono la diluizione.

Il secondo caso considerato è relativo a un test sperimentale di incendio in un ambiente (stanza) munito di una porta di ingresso. L'incendio, da innesco di gas metano, è situato al centro della stanza e, dopo un breve transitorio, si instaura un regime di flusso che richiama aria fresca dalla parte bassa della porta e scarica i prodotti di combustione attraverso la parte alta. Nell'articolo di riferimento [4] viene effettuato un confronto fra i risultati sperimentali e quelli ricavati da simulazioni numeriche con differenti sottomodelli di combustione. I risultati dell'applicazione di KFX-99 a questo caso sono mostrati in figura 2, ove si evidenzia un miglior accordo tra il profilo di temperatura calcolato, con KFX-99, lungo l'asse verticale della porta di ingresso alla stanza ed i dati ottenuti sperimentalmente. Infatti, KFX-99 utilizza l'Eddy Dissipation Model che risulta più accurato degli altri modelli di combustione nella rappresentazione del comportamento dei prodotti di combustione (in sostanza questi ultimi sovrastimano lo spessore dello strato superiore, più caldo, che corrisponde al fumo).

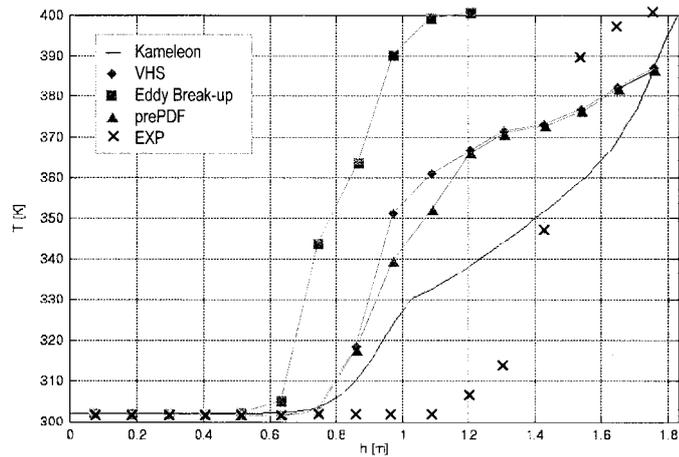


Figura 2 – Distribuzione di temperatura lungo l'asse verticale della porta (confronto tra differenti modelli di combustione e KFX-99)

Questo caso test, avente lo scopo principale di validare il codice KFX-99 con dati sperimentali e quindi accertarne l'idoneità per tali applicazioni, è importante in quanto rappresentativo di situazioni di incendio che possono verificarsi in magazzini di impianto, ove vengono stoccate sostanze pericolose, e che sono difficilmente analizzabili con codici semplificati. Infatti, in un locale chiuso, l'evoluzione dell'incendio e la sua severità dipendono dalla stretta interazione che esiste tra i processi di:

- Fluidodinamica (flussi in ingresso ed uscita e movimenti interni di aria fresca e fumi caldi)
- Combustione (bruciamento del combustibile)
- Trasferimento del Calore (per irraggiamento, convettivo tra fumi caldi e pareti e conduttivo tra pareti e combustibile).

Aspetto che è ben evidenziato nella seguente figura 3, che mostra le correnti di aria e dei prodotti di combustione e la distribuzione della temperatura all'interno della stanza in oggetto, ottenuti sempre con KFX-99.

Un'altra interessante opzione del codice KFX-99 è quella di poter considerare, nel corso della simulazione, l'intervento di sistemi di mitigazione ad acqua solitamente presenti all'interno degli locali per ridurre gli effetti di un eventuale incendio.

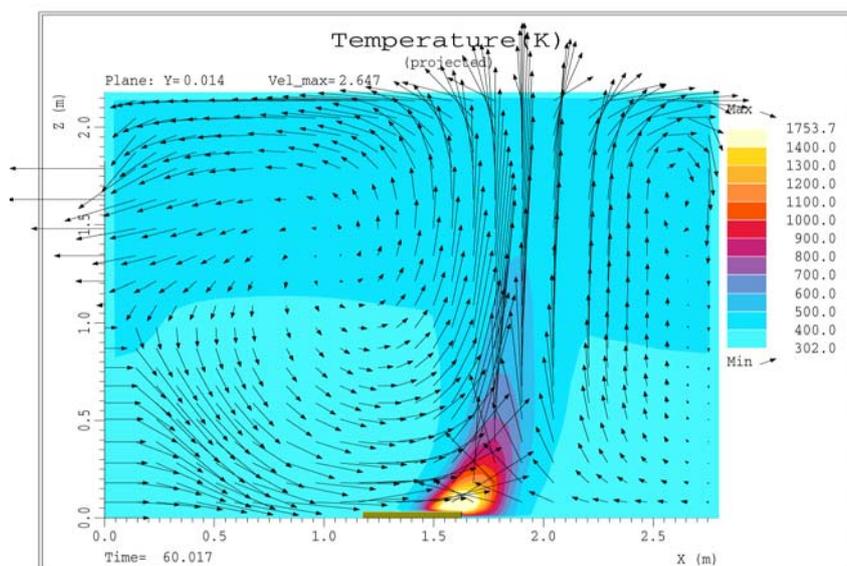


Figura 3 – Correnti interne e distribuzione della temperatura lungo l'asse della porta

L'ultima applicazione che viene presentata è relativa ad un caso sperimentale di esplosione confinata, descritto in [5] e simulato con SPL-EXPSIM. La situazione di riferimento, come mostrato in figura 4, è rappresentata da un ambiente confinato di dimensioni reali, munito di un'apertura sulla parete frontale e di due file regolari di ostacoli all'interno; il volume libero venne riempito con una miscela stechiometrica di aria-propano e successivamente innescato nella parte posteriore.

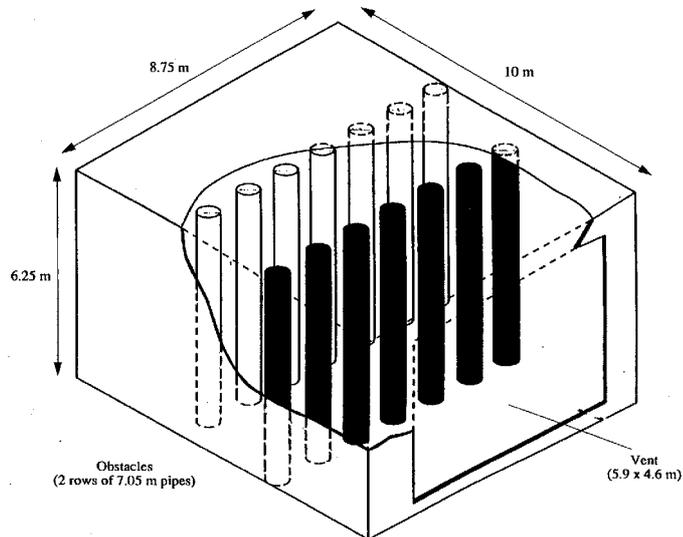


Figura 4 – Sketch della camera ventata per l'esperimento di esplosione [5]

Per la simulazione con SPL-EXPSIM si è reso necessario effettuare una semplificazione in quanto il codice non è in grado di trattare geometrie 3-D; la schematizzazione bidimensionale utilizzata è rappresentata dalla sezione orizzontale riportata in figura 5 che, in questo caso, non risulta sensibilmente penalizzante in quanto l'altezza del modulo è uniforme, la sezione (inclusa la distribuzione degli ostacoli) non cambia con la quota ed è presente un confinamento lungo la direzione verticale per la presenza della base e del tetto.

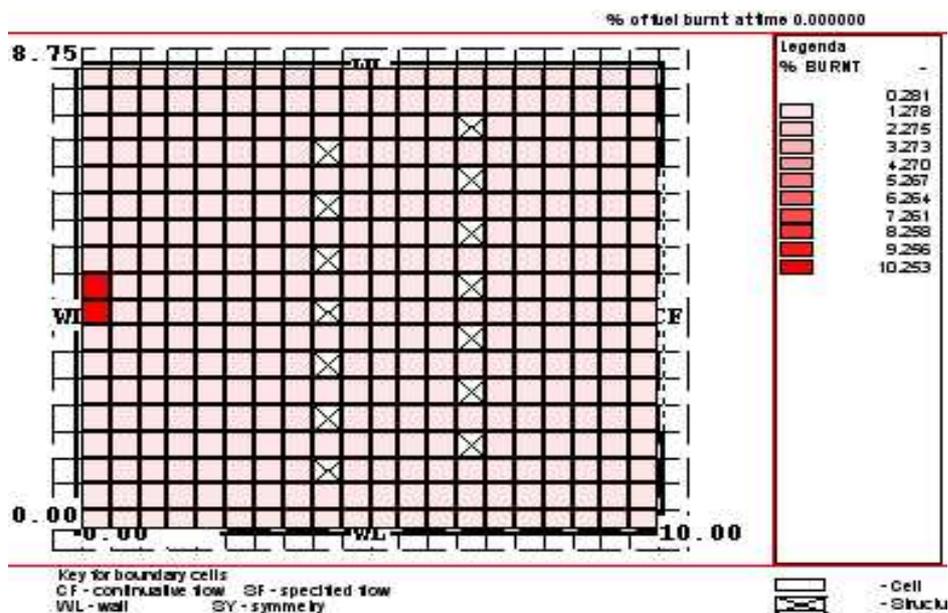


Figura 5 – Dominio geometrico 2-D per la simulazione dell'esplosione con SPL-EXPSIM

Il picco della sovrappressione e il relativo istante in cui viene raggiunto, misurati in corrispondenza della apertura, sono confrontati (in tabella 1) con i valori calcolati da SPL-EXPSIM. Si può notare come il valore massimo della sovrappressione viene correttamente riprodotto, mentre esiste una certa discrepanza (sottostima) sul tempo di raggiungimento. Ciò dimostra che il codice è in grado di descrivere accuratamente il processo di combustione ed espansione dei gas combusti che, per effetto della turbolenza generata dall'interazione con gli ostacoli, fa accelerare la fiamma e determina l'entità della sovrappressione, ma risente della mancanza di un sottomodello che simuli la fase iniziale - laminare - di propagazione di fiamma e la sua transizione al regime turbolento.

	Valore Sperimentale	Valore calcolato con EXPSIM
Picco di sovrappressione [bar]	0.35	0.38
Istante di raggiungimento [ms]	700	234

Tabella 1 – Confronto fra i valori misurati e calcolati della sovrappressione

4. CONCLUSIONI

I promettenti risultati ottenuti negli esempi presentati, hanno dimostrato alcune possibili applicazioni dei codici CFD all'analisi delle conseguenze di eventi incidentali. La necessità di descrivere fenomeni fisici complessi e la loro evoluzione temporale, strettamente dipendente dalle condizioni al contorno, sottolinea l'importanza di un approccio di calcolo dettagliato, quale insito in questi codici di simulazione che, in certi casi, consentono di evidenziare situazioni di pericolo che non sarebbero rilevabili con la applicazione dei modelli semplificati solitamente utilizzati.

L'incremento delle capacità di calcolo degli attuali computer, unito al miglioramento dei modelli matematici descrittivi dei fenomeni in gioco e all'introduzione di algoritmi risolutivi più avanzati, consente ormai di estendere l'applicazione dei codici CFD direttamente alle analisi di rischio.

Una importante peculiarità di alcuni codici fluidodinamici è rappresentata dalla possibilità di accoppiamento con quelli di analisi strutturale e quindi dall'utilizzo immediato dei risultati forniti dai codici CFD per un'analisi integrata ai fini progettuali. Inoltre, l'importazione diretta nei codici CFD di files CAD, permette, oltre ad una notevole economia nella preparazione dell'input, di ottenere "meshature" che riproducono fedelmente l'impianto da studiare e di utilizzare modelli più accurati/raffinati solo ove necessario senza appesantire notevolmente i tempi di calcolo.

5. RINGRAZIAMENTI

Si ringrazia il collega Ing. Fabrizio Guerini-Rocco, del servizio Salute, Sicurezza, Ambiente e Qualità (HSEQ) della Snamprogetti, per il suo contributo alla preparazione della presente memoria.

6. BIBLIOGRAFIA

- [1] B.E. Vembe et al., KameleonFireEx-98 User Manual, SINTEF, 1999
- [2] EXPSIM, User Manual MUT.AF.CON.0016, rev.1, Snamprogetti SpA, 2002
- [3] Nedelka & Dubost, "Flare or Vent?", paper 11, session 8, 10th LNG Int. Conf., 1995
- [4] H. Xue et al., "Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation", *Fire Safety J.*, 36 (2001)
- [5] Bimson et al., "An Experimental Study of the Physics of Gaseous Deflagration in a Very Large Vented Enclosure", 124th Int. Coll. on the Dynamics of Explosive & Reactive Systems, Coimbra (P), October 1993
- [6] Blast & Fire Project - Phase 2, "Comparison and Assessment of Hydrocarbon Gas Explosion Predictive Models", SCI, London 1996
- [7] G. Ooms, "A new method for the calculation of the plume path of gases emitted by a stack", *Atm. Environment*, vol. 6, pp. 899-909, 1972