POLITECNICO DI MILANO
Scuola di Ingegneria Industriale e dell'informazione

Corso di laurea in Ingegneria della prevenzione e della sicurezza nell'industria di processo

MODELLAZIONE IN CFD DI UN GETTO: REGOLE DI BUONA PRATICA PER UNA SIMULAZIONE AFFIDABILE

Relatore: Prof.ssa Valentina Busini

Tesi di laurea magistrale di:
Francesco Lopriore
Matr. 818123

Anno accademico 2014/2015

“ Esiste sempre un motivo ”

Indice

Modellazione in CFD di un getto ad alta pressione ..... **I**

Nomenclatura ..... **I**

Introduzione ..... **I**

Materiali e Metodi ..... **III**

Risultati ..... **VII**

Metodologia proposta per punti ..... **XX**

Conclusioni ..... **XX**

Bibliografia ..... **XXII**

Introduzione **1**

Nomenclatura **5**

Capitolo 1 ..... **8**

Stato dell'arte **8**

1.1 Tipologie di rilasci accidentali **8**

1.1.1 Generalità 8

1.1.2 Casistica 9

1.1.2.1 Rilascio monofase liquido 9

1.1.2.2 Rilascio monofase gassoso 11

1.2 Rilasci gassosi in atmosfera **12**

1.3 Getti in letteratura **12**

1.4 Free Jet **15**

1.4.1 Getti circolari 17

1.4.2 Getto piano 19

1.4.3 Getto radiale 20

1.5 Ground jet **21**

1.5.1 Getto piano 21

1.5.2 Getti radiali 23

1.6 Diametro equivalente **23**
1.7 Decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto libero **25**
1.8 Simulazione numerica di un getto **26**
Capitolo 2 ..... **28**
Metodi di modellazione **28**
2.1 Parametri per la descrizione analitica di un getto **28**
2.2 Modelli integrali **35**
2.3 Modelli CFD **36**
2.3.1 Equazioni di bilancio 37
2.3.2 Massa 39
2.3.3 Equazione di quantità di moto 39
2.3.4 Equazione dell'energia 41
2.4 Turbolenza **42**
2.4.1 Approccio RANS 44
2.4.2 Modello k-ε 45
2.4.3 Modello k-ω 47
2.5 Risoluzione in CFD delle equazioni di bilancio **48**
2.5.1 Metodi di discretizzazione 50
2.6 Griglia di calcolo (mesh) **52**
2.7 Influenza delle condizioni atmosferiche **55**
Capitolo 3 ..... **59**
Risultati **59**
3.1 Definizione del caso studio **59**
3.1.1 Condizioni operative 60
3.2 Calcolo della distanza di danno **61**
3.3 Analisi tramite i modelli integrali **63**
3.3.1 Parametri in ingresso 63
3.3.2 Parametri in uscita 65
3.4 Modellazione con Ansys Fluent **68**
3.4.1 Verifica delle caratteristiche del fluido 69
3.4.1.1 Gas ideale 69

3.4.1.2 Gas denso ... 71
3.4.1.3 Incomprimibilità ... 72
3.4.2 Geometria ... 73
3.4.3 Calcolo della portata uscente dal foro ... 74
3.4.4 Griglia di calcolo ... 75
3.4.5 Boundary conditions ... 76
3.4.6 Fase 1 ... 77
3.4.6.1 Sottodominio fitto ... 77
3.4.6.2 Criteri di convergenza ... 78
3.4.6.3 Risultati ottenuti ... 78
3.4.6.4 Sottodominio allungato ... 81
3.4.7 Fase 2 - Simulazione di un getto libero in CFD ... 84
3.4.7.1 Impostazione delle simulazione per *free jet* ... 85
3.4.7.2 Risultati ottenuti ... 86
3.4.8 Fase 3 – Reinserimento del terreno ... 88
3.4.8.1 Impostazione della simulazione per la fase 3 ... 89
3.4.8.2 Terreno impostato come *simmetry* ... 90
3.4.8.3 Terreno impostato come *wall* ... 91
3.4.9 Impostazione della simulazione ... 92
3.4.10 Metodologia ... 93

Conclusioni ... 94

Ringraziamenti ... 96

Bibliografia ... 97

MODELLAZIONE IN CFD DI UN GETTO AD ALTA PRESSIONE

di Francesco Lopriore

Nomenclatura

b_1, b_2, b_3	Costanti del modello analitico del TNO
d_o	Diametro della sezione di rilascio [m]
K_v	Lunghezza adimensionale della *potential core region* [/]
j_m	Concentrazione a distanza x lungo l'asse del getto
LFL	Limite inferiore di infiammabilità
U_o	Velocità della sezione di efflusso [m/s]
U_m	Velocità del getto in corrispondenza dell'asse [m/s]
x	Distanza longitudinale dalla sezione di rilascio [m]
x_c	Lunghezza della *potential core region*
y	Coordinata trasversale [m]
ρ'_{ga}	Densità relativa tra gas e aria a condizioni ambiente [/]
$\rho'_{0,eq}$	Densità relativa tra gas e aria in prossimità del diametro equivalente. [/]

Introduzione

Lo sviluppo di tecnologie sempre più avanzate ha condotto ad una sempre più alta sensibilità nei confronti della sicurezza dei processi industriali.
Le normative vigenti hanno imposto alle aziende livelli di sicurezza più alti e più restrittivi, concedendo così una maggiore importanza e rilevanza al settore della sicurezza dell'industria di processo.

In particolare rivestono una notevole importanza lo studio e l'analisi delle conseguenze derivanti da incidenti industriali. Si presta una grande attenzione alle conseguenze derivanti dal rilascio in ambiente di una qualunque sostanza tossica o infiammabile, sia che questa sia rilasciata per diffusione, sia che questa sia rilasciata in modo tale da provocare un getto. Nel secondo caso alcune differenze insorgono a seconda della presenza o meno di ostacoli posti dinnanzi al getto, della posizione della sezione di rilascio rispetto al terreno, provocando delle modifiche nella fluidodinamica del getto stesso e la generazione di possibili zone di ristagno della sostanza rilasciata.

Si deduce quindi come possano essere notevoli le diversità tra un rilascio in campo aperto ed uno in ambiente confinato.

Il livello di dettaglio raggiunto oggi dalla CFD ha permesso di poter simulare un rilascio anche in ambiente confinato, ottenendo cosi dati utili per lo studio delle conseguenze derivanti da quest'ultimo. Risulta però interessante effettuare un confronto tra i risultati dei codici CFD e quelli di software più diffusi, basati su modelli integrali e anche con gli ampiamente convalidati modelli analitici.

L'analisi qui effettuata vuole proporre una procedura e una metodologia per la modellazione fluidodinamica di un getto, costituito dal rilascio di gas metano stoccato all'interno di un rigassificatore a pressione pari a 64.12 bar e a una temperatura di 4.5°C. Un rigassificatore, definito anche ORV, costituisce un impianto industriale utilizzato per riportare in fase gas il GNL (Gas Naturale Liquefatto), che si trova in fase liquida per il trasporto marittimo, così che possa essere trasportato poi via terra e immesso nella rete di distribuzione.

Uno dei pericoli assolutamente non trascurabili consiste nella presenza delle grandi quantità di metano, facilmente infiammabile; questo, infatti, compone il GNL per una percentuale compresa tra il 90% e il 99% molare.

Le conseguenze di un rilascio vanno poi ben definite poiché a seconda della temperatura i vapori di GN si comportano da gas leggeri o densi: a temperature basse il GN assume il comportamento di un gas denso, ossia

di un gas con densità maggiore dell'aria, provocando perciò una stratificazione del fluido nella parte più prossima al terreno, coinvolgendo così persone, ambienti e costruzioni nella zona interessata dal rilascio.

Trattandosi dunque di un'analisi di un getto in ambiente, ci si potrebbe avvalere dell'utilizzo di un modello integrale; la presenza di ostacoli e ambienti confinati fa sì però che vi siano zone di ristagno di fluido, scie o punti di ricircolazione che influiscono sull'inglobamento di aria all'interno della nube o del getto e quindi sulla distanza raggiunta. Come verrà in seguito evidenziato in questa trattazione, l'effetto del terreno non è assolutamente trascurabile e per rilasci da quote prossime al terreno risulta di fondamentale importanza riuscirne a determinarlo.
E' necessario dunque un livello di dettaglio maggiore e poter simulare correttamente la situazione considerata.
Si possono dedurre, per i motivi sopra elencati, le notevoli differenze tra rilascio in ambiente confinato e in campo aperto; risulta perciò importante capire quando potersi affidare ad un modello piuttosto che ad un altro (CFD vs. integrale o analitico), a seconda delle caratteristiche del getto e dell'ambiente.
La geometria del problema analizzato prevede un rilascio in campo aperto, che trova origine da una cricca formatasi sulla superficie laterale di un tubo uscente dall'ORV. Questo lavoro, come già detto, vuole proporre una procedura per la modellazione fluidodinamica di un getto, andando ad evidenziare i problemi e le complicazioni nelle quali è possibile insorgere se non si prende atto di alcune accortezze necessarie nella trattazione del caso. Inoltre verrà effettuato un confronto tra diversi modelli, evidenziando i limiti degli uni e degli altri.

Materiali e Metodi

Un getto viene definito come un rilascio in atmosfera di uno specifico inquinante, sia esso infiammabile o tossico, caratterizzato da un'elevata

energia cinetica, dovuta alle condizioni a monte della sezione di rilascio.

In letteratura sono diverse le pubblicazioni relative all'analisi di un getto libero, al contrario risultano meno quelle relative all'analisi di un getto contestualizzato in un ambiente ben specifico, sia esso in una condizione di campo aperto, sia esso in una condizione di *impingement*.

Per quanto riguarda le analisi e gli studi su getti liberi, queste si preoccupano di convalidare l'analisi matematica del fenomeno con prove sperimentali, durante le quali i dati raccolti, in particolare quelli riguardanti velocità e concentrazione lungo l'asse del getto, sono stati raccolti tramite gascromatografia.

La convalida di un modello matematico consiste dunque in un confronto tra le soluzioni analitiche e i dati ottenuti dall'evidenza sperimentale. Nella trattazione analitica, può essere interessante andare a stimare il decadimento della velocità e della concentrazione lungo l'asse del getto stesso; a questo proposito risulta utile e soddisfacente la trattazione di Awbi [1], contenente l'equazione:

$$\frac{U_m}{U_0} = \frac{K_v}{\frac{x}{d_0}} \tag{1}$$

dove il temine U_m rappresenta la velocità lungo l'asse del getto, U_o è il valore della velocità in corrispondenza del punto di rilascio, d_o rappresenta il diametro della sezione di rilascio, x è la distanza lungo l'asse del getto generato e il termine K_v è una costante rappresentativa della lunghezza adimensionalizzata della cosiddetta *potential core region,* ovvero quella zona iniziale del getto in cui la velocità lungo l'asse del getto stesso coincide pressoché col valore della velocità di efflusso nel punto di rilascio.

E' possibile definire allora K_v come:

$$K_v = \frac{x_c}{d_0} \tag{2}$$

dove x_c rappresenta la lunghezza della *potential core region*.

Le teorie al riguardo sono diverse, dunque anche il valore della costante K_v cambia a seconda della teoria e il suo valore viene stimato tramite evidenza sperimentale. I valori di riferimento sono tre:

Tabella 1 Valori della costante K_v

	K_v
Tollmien	7.32
Goertler	5.75
Rajaratnam	6.3

Tramite l'analisi sopra citata, è possibile riuscire a calcolare la velocità lungo l'asse del getto in corrispondenza di una determinata distanza dalla sezione di efflusso.

Per una descrizione del decadimento di un getto libero, sono richieste variabili quali il rapporto tra la concentrazione del gas lungo l'asse e in corrispondenza del punto di rilascio $\frac{j_m}{j_0}$, il rapporto $\frac{U_m}{U_0}$, la distribuzione di concentrazione e velocità nel piano perpendicolare all'asse del getto e l'origine apparente di quest'ultimo.

La distribuzione sopra citata può essere ben approssimata in un piano perpendicolare all'asse del getto, secondo l'analisi condotta dal TNO [2], da una distribuzione esponenziale del tipo:

$$\frac{j_{x,y}}{j_m} = e^{-b_2 b_3^2} \tag{3}$$

per quanto riguarda la concentrazione, e del tipo:

$$\frac{U_{x,y}}{U_m} = e^{-b_1 b_3^2} \tag{4}$$

per quanto riguarda la velocità, in un piano perpendicolare all'asse del getto.

Le costanti di distribuzione b_1, b_2, b_3 hanno significati differenti e precisi; in particolare b_1 e b_2 sono costanti che assumono valori bene precisi a seconda del gas ed il loro valore dipende dalla densità relativa del gas rispetto all'aria $\rho'_{g,a}$.

Esse sono definite come:

$$b_1 = 50.5 + 48.2\,\rho'_{g,a} - 9.95\left(\rho'_{g,a}\right)^2 \tag{5}$$

$$b_2 = 23 + 41\rho'_{g,a} \tag{6}$$

Bisogna precisare che tali espressioni sono state ricavate per un numero basso di valori, valori di densità relativa che variano tra 0.14 e 1.53.

b_3, in questa trattazione, rappresenta il rapporto tra la distanza dall'asse del getto e quella dall'origine apparente; in

essa è contenuta la dipendenza dalla distanza dal foro di rilascio e viene definita come:

$$b_3 = \frac{y}{x + x'} \tag{7}$$

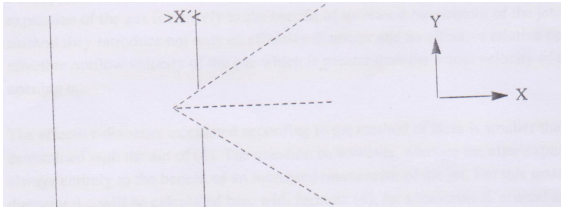

Figura 1 Posizione dell'origine apparente

Per la determinazione analitica della concentrazione lungo l'asse del getto, il presente lavoro si avvale del modello analitico descritto dal TNO [2], il quale prevede la relazione:

$$j_m = \frac{\frac{b_1 + b_2}{b_1}}{0.32 \frac{x}{d_{eq}} \frac{\rho'_{g,a}}{\sqrt{\rho'_{0,eq}}} + 1 - \rho'_{g,a}} \tag{8}$$

dalla quale è possibile ricavare valori definiti di concentrazione ad una determinata distanza oppure calcolare la distanza di danno raggiunta da un determinato valore di concentrazione come ad esempio il limite inferiore di infiammabilità.

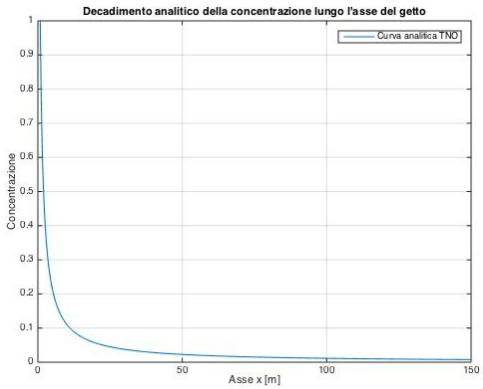

Figura 2 Decadimento analitico della concnetrazione lungo l'asse de getto

Si può dedurre come, nell'ambito della prevenzione e della sicurezza nell'industria di processo, i limiti di infiammabilità ricoprano un ruolo fondamentale, in particolare quello inferiore.

I valori e di dati dei modelli analitici possono essere in seguito confrontati con quelli disponibili per la modellazione del fenomeno, in particolare con quelli integrali e con i modelli tridimensionali; i primi si preoccupano di una risoluzione semplificata dei diversi bilanci di materia, energia, e quantità di moto, originando così un sistema di equazioni differenziali ordinarie non risolvibili analiticamente, bensì tramite un'integrazione numerica, considerando un determinato volume di controllo; i modelli tridimensionali

basano la loro risoluzione sull'integrazione numerica delle equazioni di bilancio di materia, energia e quantità di moto , andando, al contrario dei modelli integrali, a considerare la forma completa di tali equazioni, originando così un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali.

In aggiunta a tali equazioni, si aggiungono poi le diverse equazioni relative alla turbolenza del fenomeno, considerando i modelli di chiusura come il modello k-ε e il modello k-ω.

In tale trattazione, come rappresentanza dei modelli tridimensionali (CFD) è stato preso in considerazione il software Ansys Fluent 15; per quanto concerne i modelli integrali invece, un software particolarmente utilizzato nell'ambito della sicurezza e della prevenzione nell'industria di processo, PHAST 6.42.

Risultati

Il lavoro svolto ha voluto porsi come obiettivo la simulazione fluidodinamica di un getto ad alta pressione di gas naturale, mettendo in risalto quali possano essere alcune delle problematiche in cui è possibile incorrere nello sviluppo di un lavoro analogo.

In primo luogo si è voluto analizzare lo sviluppo del getto tramite il software PHAST , rappresentante dei modelli integrali. E' stata fatta questa scelta per poter utilizzare nel modello analitico e nel modello CFD il diametro equivalente restituito da PHAST, in modo da migliorare la confrontabilità dei risultati ottenuti poiché riferiti tutti alla stessa sezione di rilascio. Il valore di tale diametro è comunque calcolabile analiticamente; la simulazione in CFD a partire dal diametro equivalente calcolato da PHAST ha permesso di semplificare molto la trattazione; infatti, considerando il getto a partire dal suo diametro equivalente si è trascurata la parte iniziale di *potential core region* in cui i fenomeni legati alla comprimibilità del gas hanno un importanza rilevante.

Si è dunque potutoconsiderare il gas come ideale e incomprimibile, semplificando la trattazione CFD e diminuendo i tempi di calcolo. Per la simulazione in PHAST si sono

considerate le condizioni di stoccaggio del gas riportate in tabella:

Tabella 2 Dati utilizzati in PHAST

Materiale	
Nome	Metano
Stoccaggio	Gas sotto pressione
Pressione	64.12 bar
Temperatura	4.5°C
Massa	10^9 kg
Scenario	
Tipologia	Perdita
Fase di rilascio	Vapore
Diametro del foro	25.4 mm (1 inch)
Posizione	
Altezza	1 m
	25 m
Interno/esterno	
Posizione del rilascio	Rilascio in campo aperto
Direzione del rilascio	Orizzontale
Condizioni climatiche	
Velocità del vento	5 m/s
Classe di stabilità di Pasquill	D
Rugosità della superficie	1 cm
Temperatura atmosferica	28°C
Temperatura della superficie	28°C
Umidità relativa	0.62

Tramite PHAST sono stati considerati due casi, uno con il foro di rilascio a 1 m dal terreno, l'altro con il foro a 25 m dal terreno. Si è deciso di effettuare questo per rendere i risultati raccolti tra i vari modelli maggiormente confrontabili tra loro, come verrà mostrato in seguito.

I risultati restituiti da PHAST sono quelli utilizzati in seguito come input per la simulazione tramite i modelli tridimensionali e sono riportati nella tabella 3. Tali valori, inseriti nelle impostazioni dei modelli tridimensionali, sono stati utili, come già detto, per semplificare la simulazione in CFD; in Fluent quindi non è stata più considerata la sezione di rilascio avente il diametro originale pari ad un pollice, ma una sezione avente il diametro pari a quello equivalente restituito da PHAST.

Tabella 3 Valori restituiti da PHAST

Grandezza	**Valore**
Generale	
Portata massiva	5.55 Kg/s
Durata del rilascio	3600 s
Dati di uscita dell'orifizio o del tubo (prima dell'espansione atmosferica)	
Pressione	34.80135 bar
Temperatura	-38.54095 °C
Velocità in vena contratta	377.86829 m/s
Coefficiente di efflusso	0.86828

Dati finali (dopo l'espansione atmosferica)	
Temperatura	-65.72466°C
Raggio espanso	0.07037 m
Velocità	376.62030 m/s

In figura 3, vengono riportati i due diversi andamenti ricavati da PHAST riferiti alle diverse quote, in cui è stato evidenziato il valore di LFL relativo al metano.

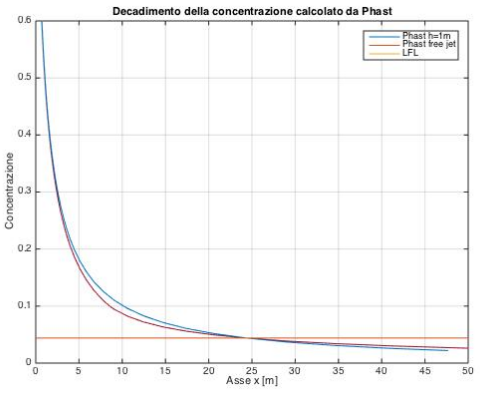

Figura 3 Confronto delle due diverse simulazioni effettuate con PHAST 6

Si nota come le due curve portino a due valori di distanze di danno molto vicini, 24 m per la simulazione con il foro a 25 m e 25 m per quella con il foro a 1 m; il lieve scostamento tra i due andamenti nella curvatura è dovuto in parte all'influenza del terreno, in parte a diversi valori di velocità de vento, 5.97 m/s per quella a 25 m di quota e 4 m/s per la simulazione a 1 m da terra . Il valore della velocità è infatti direttamente proporzionale all'aumentare della quota; pertanto, pur impostando la medesima classe di stabilità atmosferica, i due casi saranno analizzati dal programma considerando due valori differenti di velocità. L'accorciamento della curva a 25 m di altezza, è giustificato poiché un valore di velocità più elevato aumenta la miscelazione, provocando una diminuzione dell'estensione del getto.

Gli andamenti della concentrazione ricavati dal modello analitico e da PHAST sono riportati in figura 4. La curva di PHAST raffigurata è quella relativa a una quota pari a 25 m, per rendere la simulazione di PHAST maggiormente assimilabile ad un getto libero descritto con il modello analitico.

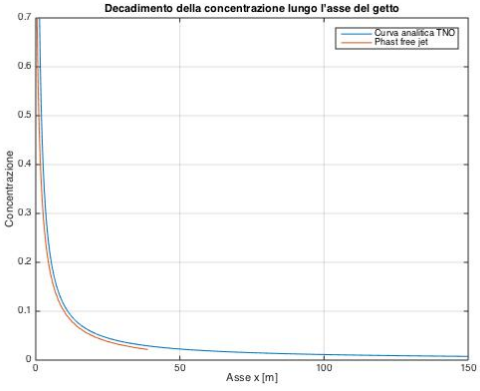

Figura 4 Decadimento della concentrazione ricavata da PHAST e confrontato con il modello analitico del TNO

Come già affermato precedentemente, un valore per quantificare la magnitudo del fenomeno è sicuramente la distanza raggiunta in corrispondenza di un valore di concentrazione definito, come ad esempio quello del limite inferiore di infiammabilità (LFL).

Per il modello analitico proposto dal TNO [2], la distanza di danno in corrispondenza di un valore di concentrazione pari al LFL è pari a 26 m, mentre il software PHAST, come già detto, restituisce valori compresi tra 24 e 25 m, rispettivamente per il caso a 25 m e quello a 1m, valori in accordo e confrontabili.

A questo punto ci si è focalizzati sull'obiettivo principale di questa trattazione, la modellazione in CFD del getto.

In una prima analisi, sono state costruite tre tipologie differenti di griglie di calcolo, per poter considerare i risultati ottenuti indipendenti dalla mesh; le griglie di calcolo sono state implementate tramite l'utilizzo del *mesh editor* Gambit 2.4.6. Sono state costruite tramite la definizione di un volume sufficientemente grande da non condizionare i risultati, ma allo stesso tempo non troppo grande in modo da non aumentare in modo considerevole il costo computazionale delle simulazioni.

Le dimensioni quindi del dominio di calcolo, decise in base alle regole di buona pratica, sono 300 x 50 x 50 m^3, rispettivamente in direzione x, y e z. Il rigassificatore (ORV), posizionato a 40 m dalla faccia di ingresso del dominio è stato costruito avente la forma di un parallelepipedo di dimensioni 16 x 8 x 8 m^3, in corrispondenza del quale è stato predisposto un tubo a sezione circolare del diametro di 0.8 m, sul quale si ipotizza una cricca approssimabile ad una sezione circolare del diametro equivalente pari ad un pollice, che rappresenta dunque la sezione di rilascio, posizionata ad un metro dal suolo.

Le griglie considerate hanno caratteristiche riportate in Tabella 4.

Tabella 4 Mesh utilizzate per una prima fase CFD

	Numero di celle	**Volume minimo delle celle [m^3]**	**Volume massimo delle celle [m^3]**
Mesh 1	1 734 656	$1.84\ 10^{-8}$	2.69
Mesh 2	4 154 796	$1.84\ 10^{-8}$	1.05

Mesh 3	4 635 912	$1.84\ 10^{-8}$	1

Per infittire il più possibile alcune zone di maggiore interesse è stato costruito un sottodominio virtuale di dimensioni 40 x 20 x 30 m^3 attorno alla geometria., come mostrato in figura 5.

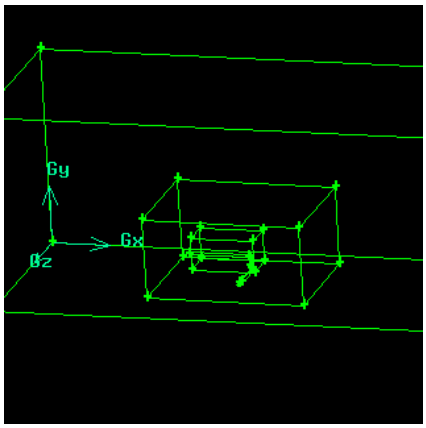

Figura 5 Sottoodominio costruito attorno alla geometria tramite il software Gambit 2.4.6

Lo scopo di tale sottodominio è appunto quello di permettere l'infittimento delle zone più vicine al getto, lasciando così la mesh più lasca laddove non sia necessario un grado di infittimento elevato.

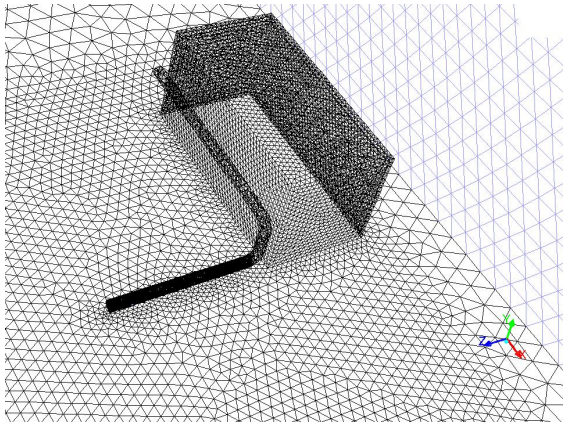

Figura 6 Esempio di griglia di calcolo costruita per la geometria considerata (vista all'interno del sottodominio)

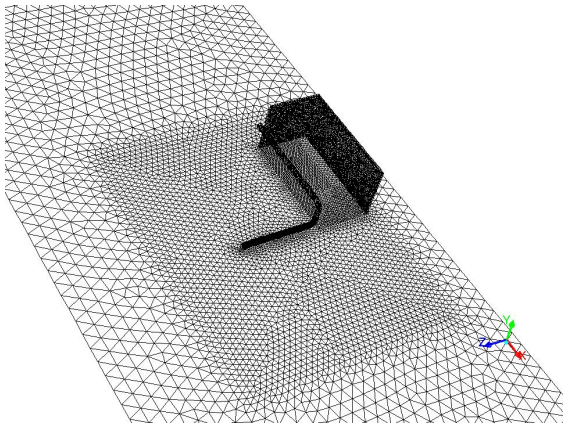

Figura 7 Esempio di griglia di calcolo costruita per la geometria considerata; al terreno è possibile visualizzare le dimensioni del sottodominio

A questo punto, adottando un modello di gas ideale e incomprimibile, possibile in quanto si trascura la zona iniziale del getto in cui i fenomeni legati alla comprimibilità del gas sono più rilevanti, si è passati alla risoluzione tramite i modelli tridimensionali.

L'impostazione della simulazione consiste sostanzialmente nel definire le

condizioni al contorno delle superfici costituenti la geometria del caso studio, determinando i materiali e i parametri fisici relativi al problema analizzato.

Le condizioni al contorno utilizzate in questa trattazione sono state,

- Velocity inlet, la quale prevede la determinazione di una velocità del fluido specificato all'interno del dominio; è necessario imporre la direzione della velocità, il modulo della velocità, i valori di k e di ε relativi alla superficie alla quale è applicata.
- *Mass flow inlet*, impone da una superficie una determinata portata di una sostanza o di una miscela; bisogna dunque che l'utente definisca il valore della portata, la composizione della miscela e la direzione nella quale fluisce la portata.
- *Wall*, conferisce alla superficie alla quale è riferita le proprietà di una superficie solida impenetrabile; risulta necessario imporre il valore di rugosità e di temperatura alla quale si trova.
- *Pressure outlet*, conferisce alla superficie una pressione in uscita; è necessario indicare il valore di tale pressione, di k e di ε
- *Simmetry* , la quale impone solamente le componenti della velocità perpendicolari alla superficie
- *Internal*, definisce una superficie come virtuale, interna al dominio. Dal punto di vista della geometria ciò significa che questa superficie è come se non ci fosse. Tale condizione risulta comoda nella definizione di sottodomini interni creati per la costruzione della griglia di calcolo.

Nell'ambito di questa trattazione si è impostata la faccia d'ingresso del dominio di calcolo come *velocity inlet*, inserendo una velocità in ingresso del vento pari a 5 m/s, i laterali e la faccia superiore come *velocity inlet*, l'uscita del dominio come *pressure outlet*, l'ORV, il tubo e il terreno come *wall*. La sezione di rilascio è stata impostata come *mass flow inlet*, con un valore pari a 356.9 kg/m2/s calcolato grazie ai dati di output di PHAST.

Si è scelto inoltre di considerare l'azione della gravità.

Tra le impostazioni di settaggio di Fluent è necessario selezionare quale modello di turbolenza si vuole utilizzare.

Il modello di turbolenza considerato in questo lavoro di tesi è stato il k-ε; sebbene il modello consigliato da Wilcox [3] per i getti sia il k-ω, si è deciso di adottare il k- ε per rimanere allineati con alcuni lavori precedentemente sviluppati al riguardo, i quali considerano appunto il primo modello di turbolenza citato.

I criteri di convergenza della simulazione sono stati la verifica dei bilanci di massa su tutto il dominio e i residui diminuiti di tre ordini di grandezza.

Le griglie di calcolo, costruite rispettando i canoni di buona qualità, mostrano andamenti della concentrazione lungo l'asse del getto, come quelli riportati qui di seguito, confrontati ognuno con la soluzione analitica del TNO [2].

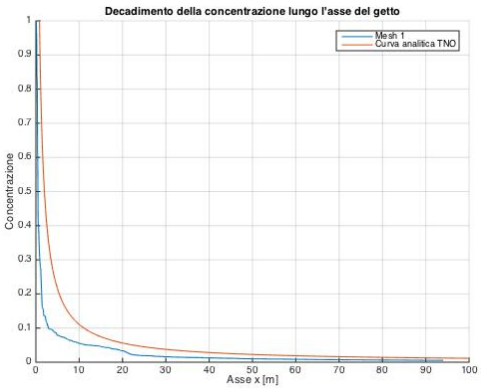

Figura 8 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 1

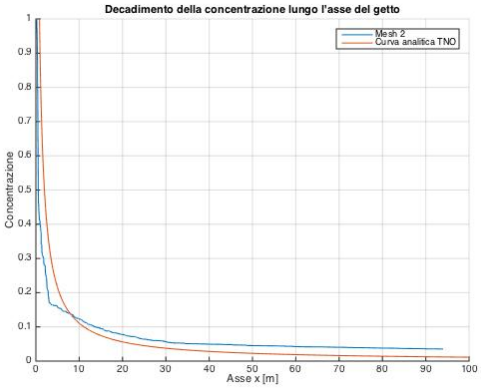

Figura 9 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 2

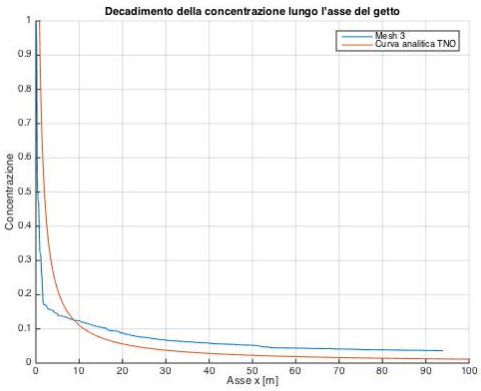

Figura 10 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 3

Le distanze di danno raggiunte per le tre mesh qui proposte sono,

Tabella 5 Distanze di danno raggiunte

Griglia di calcolo	Distanza raggiunta considerando una concentrazione pari a LFL
Mesh 1	25 m
Mesh 2	80 m
Mesh 3	80 m

La tabella 6 mostra invece i bilanci di massa relativi alle tre mesh utilizzate.

Tabella 6 Bilanci di massa

Griglia di calcolo	Bilancio di massa [kg/s]
Mesh 1	- 0.011
Mesh 2	- 0.012
Mesh 3	- 0.004

Dai risultati qui ottenuti si può notare come la mesh 1 e la mesh 2 riportino la stessa distanza di danno raggiunta, indice che l'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo è stata raggiunta; sfortunatamente però, osservando i grafici relativi al decadimento della concentrazione si può notare come nessuno dei tre andamenti ottenuti sia confrontabile con quello analitico del TNO. In particolare, oltre all'andamento totalmente differente soprattutto nei primi metri di sviluppo del getto, si nota anche un gradino.

Questo ha messo in discussione la validità delle simulazioni sviluppate, in particolare la correttezza della griglia; infatti nonostante i parametri legati alla qualità rientrassero nei canoni corretti, è possibile che le aree in cui sia richiesto un maggior infittimento o una maggiore precisione fossero caratterizzate da celle di calcolo troppo grandi. Si è pensato allora di modificare le dimensioni del sottodominio, allargandolo a dimensioni pari a 70 x 20 x 30 m^3, in modo da comprendere tutta l'area interessata dal getto.

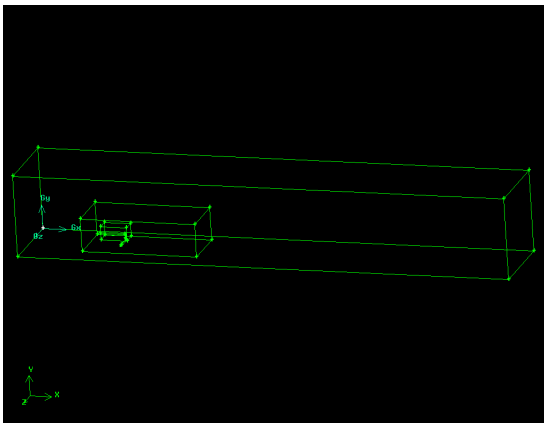

Figura 11 Geometria costruita allargando il sottodominio

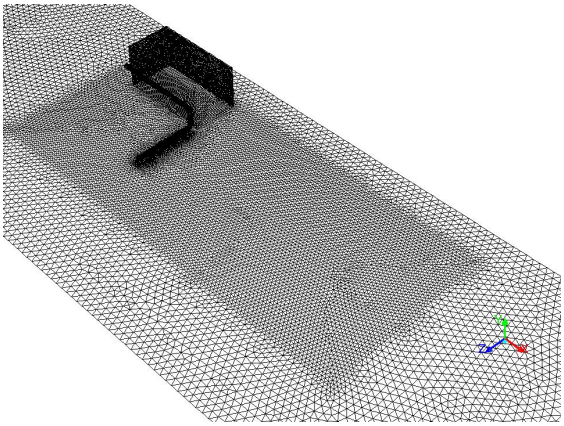

Figura 12 Esempio di griglia di calcolo costruita considerando il sottodominio allargato

Le griglie di calcolo ottenute sono le seguenti.

Tabella 7 Griglie di calcolo con il sottodominio esteso

	Numero di celle	**Volume minimo delle celle [m³]**	**Volume massimo delle celle [m³]**
Mesh 4	3 124 115	$1.84\ 10^{-8}$	1.543
Mesh 5	7 468 514	$1.84\ 10^{-8}$	$4.72\ 10^{-1}$

Gli andamenti ottenuti sono i seguenti:

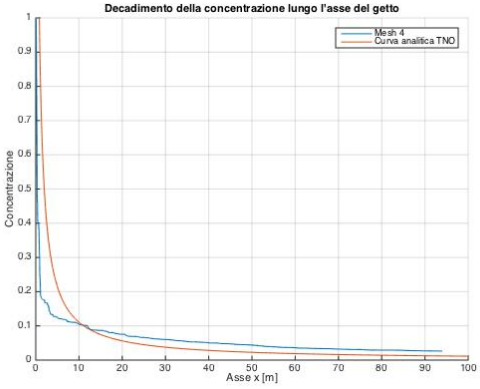

Figura 13 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 4

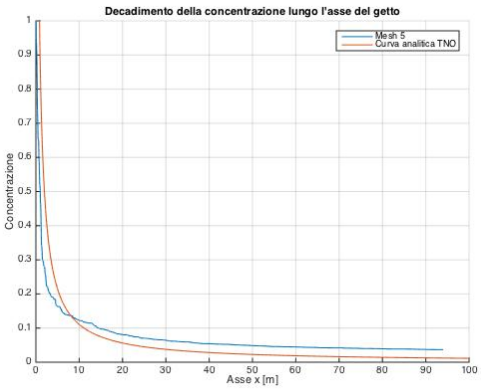

Figura 14 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 5

mentre le distanze di danno ottenute sono

Tabella 8 Distanza di danno raggiunta

Griglia di calcolo	**Distanza raggiunta considerando una concentrazione pari a LFL**
Mesh 4	80 m
Mesh 5	80 m

I bilanci di materia ottenuti sono:

Tabella 9 Bilanci di massa

Griglia di calcolo	**Bilancio di massa [kg/s]**
Mesh 4	- 0.0002
Mesh 5	0.004

Dai grafici ottenuti si evince come il gradino individuato precedentemente si sia attenuato e nella mesh 5 praticamente sparito; gli andamenti però, soprattutto nei primi metri, non sono ancora confrontabili con quelli analitici, prova del fatto che l'area coinvolta dal getto necessita di un

infittimento maggiore per tutta la sua estensione.

I valori delle distanze raggiunte, nuovamente pari a 80 m confermano l'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo.

Il dubbio maggiore allora è stato se il software Fluent fosse valido per la simulazione di getti ad alta pressione; per una verifica è stato simulato in CFD un caso di *free jet*, ovvero un getto descritto solo dall'analisi matematica, senza la presenza di una geometria che potesse influenzare il suo sviluppo; per garantire quest'ultimo aspetto si è traslato il foro ad un'altezza pari a 25 m dal suolo; la mesh è stata eseguita con il SW Workbech ed è caratterizzata dalla presenza di un tronco di cono virtuale finalizzato a seguire meglio la fisica del fenomeno.

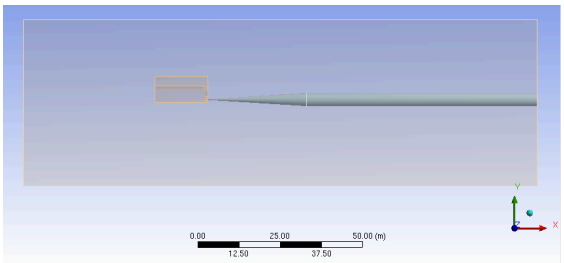

Figura 15 Geometria realizzata in Workbench per free jet

le condizioni al contorno inserite in Fluent per questa fase sono state modificate, si è lasciata la faccia d'ingresso del dominio come *velocity inlet,* l'uscita del dominio è rimasta impostata come *pressure outlet* mentre tutte le altre le facce del dominio sono state impostate come *simmetry*; la sezione di rilascio viene considerata, come per i casi precedenti come *mass flow inlet*.

Per il caso di getto libero non è stata considerata la gravità, poiché il modello analitico del *free jet* non la prevede.

Le mesh sono tre, anche in questo caso per verificare l'indipendenza dei risultati ottenuti dalla griglia di calcolo; le loro caratteristiche sono quelle riportate in tabella 10.

Tabella 10 Caratteristiche delle diverse mesh costruite per il free jet

	Numero di celle	**Volume minimo delle celle [m³]**	**Volume massimo delle celle [m³]**
Mesh 6	2 775 167	$3\ 10^{-7}$	1.07 10
Mesh 7	5 082 874	$2.72\ 10^{-7}$	3.5985
Mesh 8	10 965 647	$1.75\ 10^{-7}$	9.22

Di seguito i grafici ottenuti relativi al decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto, confrontati in

figura 16 con l'andamento analitico, e in figura 17 con quello integrale.

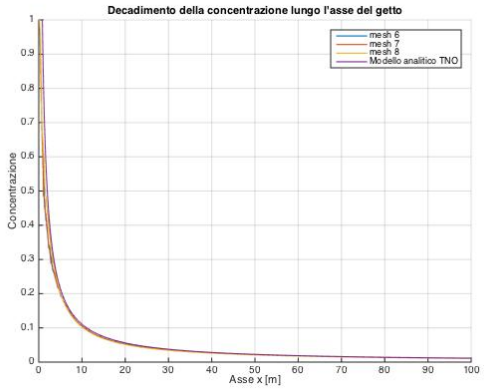

Figura 16 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 6, 7 e 8 confrontato con il modello analitico

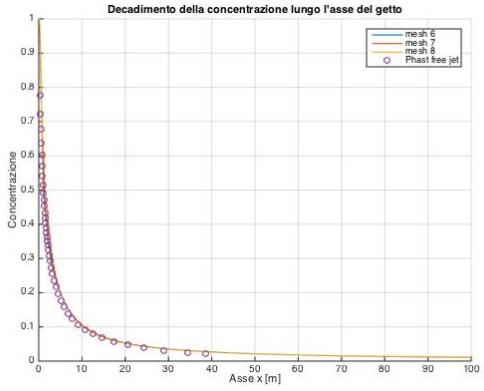

Figura 17 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 6, 7 e 8 confrontato con il modello integrale

Le distanze di danno raggiunte da un valore di concentrazione pari al limite inferiore di infiammabilità sono riportate nella tabella 11, in cui per completezza vengono riportate le distanze di danno raggiunte dal modello analitico presentato dal TNO e dal software PHAST.

Tabella 11 Distanza di danno raggiunta dal free jet, dal modello analitico e da PHAST

Griglia di calcolo	**Distanza raggiunta considerando una concentrazione pari a LFL**
Mesh 6	25 m
Mesh 7	25 m
Mesh 8	25 m
Modello analitico TNO	26 m
Modello integrale PHAST free jet	24 m

I bilanci di massa ottenuti sono:

Tabella 12 Bilanci di massa

Griglia di calcolo	**Bilancio di massa [kg/s]**
Mesh 6	0.0003
Mesh 7	$-3.69\ 10^{-5}$
Mesh 8	- 0.008

Si nota come i risultati delle mesh 6, 7 e 8 siano concordi tra loro, lasciando così supporre che l'indipendenza dalla mesh sia stata ottenuta; inoltre i risultati ottenuti sono pienamente confrontabili con quelli analitici ed integrali, potendo così affermare la validità della simulazione e delle sue impostazioni.

A questo punto si è pensato di focalizzare l'attenzione sull'effetto che

l'ambiente reale ha sullo sviluppo del getto, in particolare riguardo quello del terreno. L'idea portata avanti nel lavoro di tesi è stata quella di riportare il foro ad un metro dal terreno, considerando la geometria e le condizioni al contorno iniziali, ad eccezione del terreno; sono stati considerati due casi infatti, il primo impostando il terreno come *simmetry*, il secondo come *wall,* questo per introdurre gradualmente l'effetto del terreno sullo sviluppo del getto.

Le dimensioni del dominio di calcolo sono state ridotte, per alleggerire il costo computazionale della simulazione, a dimensioni pari a 200 x 30 x 50 m^3.

Inoltre, per inserire un maggior livello di dettaglio nella zona influenzata dal getto, si è pensato di sostituire il sottodominio con un tronco di cono virtuale capace di seguire tutto l'andamento del getto. Il tronco di cono trova dunque la sua origine a monte della sezione di rilascio e continua fino alla fine del dominio di calcolo.

La mesh considerata per questa quarta fase di simulazione, costruita con il software Workbench, è quella riportata in figura 18.

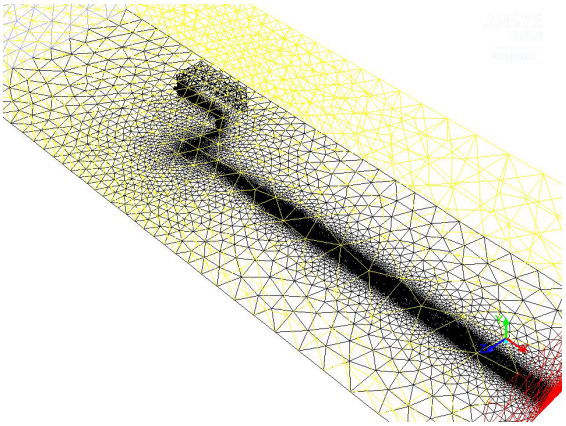

Figura 18 Mesh 9

Le caratteristiche delle celle sono quelle riportate in tabella 13.

Tabella 13 Caratteristiche della mesh 9

	Numero di celle	**Volume minimo delle celle [m^3]**	**Volume massimo delle celle [m^3]**
Mesh 9	2 126 707	$3.3131\ 10^{-7}$	8.8166 10

I risultati ottenuti variano a seconda dell'impostazione del terreno. Nelle due figure seguenti vengono riportati gli andamenti della concentrazione impostando nel primo caso il terreno come *simmetry* e nel secondo caso come *wall.*

Per completezza e confronto viene riportato in entrambi i grafici l'andamento calcolato da PHAST considerando il foro ad un'altezza pari a 1 m.

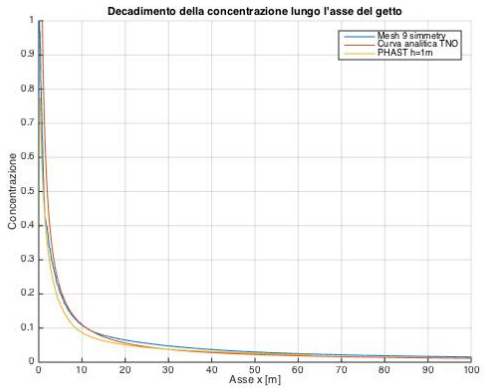

Figura 19 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 9 impostando il terreno come simmetry

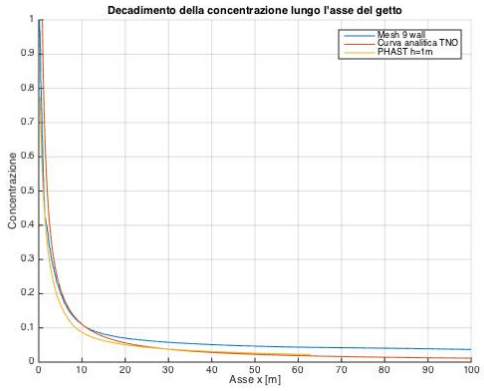

Figura 20 Decadimento della concentrazione ottenuto dalla mesh 9 impostando il terreno come wall

Le distanze di danno raggiunte sono nel primo caso pari a 35 m e nel secondo caso pari a 80 m; i bilanci di materia sono rispettivamente
$-4{,}764\ 10^{-5}$ kg/s e 0.2 kg/s.

I risultati ottenuti in questi due ultimi casi mostrano come l'andamento della curva sia confrontabile con quello analitico e come il terreno sia assolutamente rilevante ai fini della stima della distanza di danno raggiunta.

Il risultato di 80 m è concorde con quello della mesh 2, 3, 4 e 5 ma in questo caso con un andamento paragonabile a quello analitico, indice del fatto che la simulazione è stata impostata correttamente e prova che i modelli integrali risentono in modo inferiore della geometria complessa del problema, in particolare dell'effetto del terreno. Il valore superiore della distanza di danno raggiunta dimostra infatti come il getto, la cui origine è posizionata ad un metro dal suolo, rimbalzi sul terreno, prolungando in questo modo la sua estensione; come già detto precedentemente i modelli integrali, nella zona del getto di nostro interesse, non tengono pienamente conto di tale effetto.

Bisogna precisare che la scelta del modello di turbolenza è stata confermata solo dopo aver confrontato i risultati del modello k-ε con quelli del modello k-ω.

Come si nota dalla figura qui di seguito riportata, i risultati tra i due modelli di turbolenza sono assolutamente identici, motivo per il quale è stato

possibile comunque utilizzare il modello k- ε.

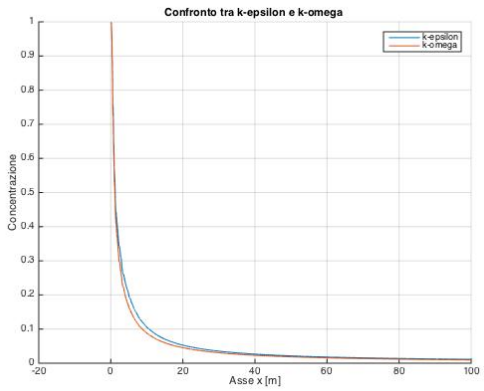

Figura 21 Confronto dei risultati ottenuti tra il modello k-ε e il modello k-ω

Metodologia proposta

La metodologia proposta in questo lavoro di tesi per una buona qualità della simulazione è:

- Costruzione della griglia seguendo le regole di buona pratica.
- Impiego di accorgimenti nella *mesh* per infittire le zone di maggior interesse, come ad esempio l'utilizzo del tronco di cono.
- Verifica dei parametri di qualità relativi alla *mesh*.
- Verifica del rispetto dei criteri di convergenza per la simulazione.
- Verifica dell'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo.
- Convalida delle impostazioni e dei risultati ottenuti con i risultati ricavati da modelli già ampiamente convalidati, come quelli analitici, in un caso semplificato.
- Modifica delle impostazioni e delle condizioni al contorno per ricondurre il caso teorico confrontabile con quello reale.

Nel momento in cui vengono modificate le condizioni al contorno è necessario prendere coscienza che non è più possibile confrontare i risultati ottenuti con modelli già convalidati.

Conclusioni

Il lavoro di tesi proposto ha focalizzato l'attenzione sul alcuni aspetti critici che possono emergere nel momento in cui si vuole analizzare lo sviluppo di un getto ad alta pressione con una geometria non trascurabile.

I risultati ottenuti mostrano infatti come i modelli integrali siano limitati nell'analizzare l'effetto delle geometria e come nell'analisi in CFD non sia sufficiente una griglia fitta ad

assicurare la validità dei risultati ottenuti. Si è infatti visto come, partendo da griglie di calcolo che, nonostante rispettassero le regole di buona pratica previste per la loro costruzione, la qualità dei risultati non fosse la migliore, in particolare si è notato come l'andamento del decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto fosse discorde con quello analitico e con quello ottenuto tramite i modelli integrali.

E' necessario dunque costatare la validità dei risultati; dopo aver effettuato diverse prove migliorando sempre più la qualità della griglia di calcolo implementata nel software sviluppato da Ansys, Fluent con l'introduzione di un tronco di cono, avente base minore a monte della sezione di rilascio e quella maggiore a valle, sviluppato in direzione parallela all'asse del getto in modo da seguire maggiormente la fisica del getto.; si è voluto in seguito verificarne la validità delle impostazioni e delle ipotesi andando a simulare un free jet in CFD.

Questo passaggio, di fondamentale importanza, è stato assolutamente necessario per accertarsi della possibilità di Fluent di simulare correttamente un getto ad alta pressione come quello proposto e, come già detto, per verificare l'esattezza delle impostazioni utilizzate nel modello tridimensionale.

Un confronto con il modello analitico dunque, in questo caso affrontato tramite la simulazione del *free jet,* risulta perciò utile e necessario se si vuole dimostrare la validità delle impostazioni utilizzate nel modello CFD.

Il lavoro di tesi ha inoltre messo in risalto gli aspetti sui quali occorre ancora fare analisi e ricerca; ad esempio, si potrebbe pensare di effettuare un'indagine più approfondita variando l'altezza del foro di rilascio, oppure, data l'influenza della geometria, l'effetto che alcuni ostacoli possono mostrare sulla turbolenza del getto.

I dati da raccogliere, al fine di generalizzare il più possibile la metodologia, sono ancora molti, tutti necessari per poter comprendere il maggior numero di scenari possibili.

Bibliografia

[1] H.B.Awbi Ventilation of Buildings (Second Edition), London: Spon Press 2003

[2] TNO, *Methods for the calculation of physical effects "Yellow Book", CPR 14E. (Part 1 & 2).* Comittee for the Prevention of Disasters, Directorate-General of Labour of the Ministry of Social Affairs and Employement. The Hague.

[3] D. C. Wilcox, *Turbolence modeling for CFD (III ed.),* DCW Industries (2006)

INTRODUZIONE

Per quanto concerne la realtà degli impianti chimici e dell'industria di processo, riveste sempre maggiore importanza il ruolo della sicurezza, applicata in maniera concorde con le normative vigenti.
L'analisi di rischio finalizzata all'identificazione e alla valutazione di eventuali pericoli risulta perciò di fondamentale importanza, concentrandosi all'interno di un dato ambiente di lavoro, sulle diverse tipologie di macchinari e delle sostanze presenti.
Il secondo parametro che sicuramente ricopre un ruolo importante è la stima della magnitudo, essendo il rischio associato ad un determinato fattore definito come il prodotto tra la probabilità di accadimento P di un fenomeno e la magnitudo M di tale fenomeno,

$$R = PxM \tag{1}$$

Si nota così quanto sia fondamentale riuscire a quantificare le conseguenze derivanti da possibili scenari incidentali, al fine di proteggere le persone e tutelare l'ambiente, evitando così incidenti gravi o perlomeno riuscire a gestire una situazione d'emergenza evitando danni gravi.
Nell'industria di processo è di fondamentale importanza l'analisi delle conseguenze derivanti da un rilascio accidentale di qualunque sostanza, sia essa un inquinante tossico o infiammabile.
Un rilascio accidentale di tale sostanza può presentarsi sotto forme diverse, è perciò necessario riuscire ad analizzare i diversi casi che possono presentarsi; inoltre bisogna tener conto delle condizioni iniziali del rilascio, poiché a seconda di queste è possibile riscontrare o meno la formazione di un getto, argomento sul quale vuole

concentrarsi il lavoro di tesi qui proposto; un getto viene definito come un rilascio in ambiente caratterizzato da un elevato valore di energia cinetica, dovuto sostanzialmente dalle condizioni presenti a monte dell'origine del getto.
Esso è contraddistinto da tre zone, la prima governata da fenomeni legati alla quantità di moto dell'efflusso, la seconda governata da forze di galleggiamento tra l'inquinante rilasciato e il fluido circostante, la terza rappresentata da un fenomeno di assoluta dispersione passiva.
Nel caso di un rilascio in atmosfera è innanzitutto necessario classificare la tipologia di quest'ultimo; sono, infatti, due i parametri che ne permettono la distinzione, il tempo del rilascio t_s, e un tempo caratteristico che ad esempio potrebbe essere il tempo necessario per il raggiungimento di un ricettore t_f posto ad una determinata distanza.
Secondo il rapporto $\frac{t_s}{t_f}$ è possibile distinguere tra un rilascio continuo ed uno istantaneo.
Nel caso in cui il rapporto $\frac{t_s}{t_f}$ sia $<< 1$, si parlerà di rilasci istantanei, ovvero quei rilasci caratterizzati dalla formazione di una nube liberata e dispersa in atmosfera.
Per la fisica del fenomeno è facile intuire come nella realtà non esistano rilasci continui, ma nel caso in cui il rapporto $\frac{t_s}{t_f}$ sia $>> 1$ è comunque possibile parlare di rilasci continui, poiché il tempo necessario all'inquinante per raggiungere un ipotetico ricettore risulta molto inferiore del tempo di rilascio in atmosfera.
Nel caso in cui il rilascio sia considerato continuo, la formazione di un getto è assai probabile se la pressione a monte della sezione di rilascio lo consente.
Tra questi scenari sicuramente sono da considerare dispersioni in aria di materiali tossici e/o infiammabili provenienti da processi dell'industria chimica, poiché l'area di interesse può raggiungere dimensioni notevoli e i danni causati a persone e ambiente possono essere gravi.
Tra gli impianti particolarmente sotto attenzione sono presenti sicuramente i rigassificatori, impianti industriali finalizzati al passaggio in fase gas di GNL (Gas Naturale Liquefatto).

Il pericolo connesso ad un'apparecchiatura di questo tipo, nonostante ormai questa venga realizzata con tecnologie altamente brevettate, consiste nella presenza di grandi quantità di metano, facilmente infiammabile; questo, infatti, compone il GNL per una percentuale compresa tra il 90% e il 99% molare.
Le conseguenze di un rilascio vanno poi ben definite poiché a temperature basse il GNL si comporta come un gas denso, ovvero come un gas con densità maggiore dell'aria, provocando perciò una stratificazione del fluido nella parte più prossima al terreno, coinvolgendo così persone, ambienti e costruzioni nella zona interessata dal rilascio.
Quest'ultimo aspetto va tuttavia analizzato in base alle condizioni di rilascio, considerando in particolar modo il rapporto tra la sua densità e quella dell'aria.
Per una valutazione e un'analisi del fenomeno, oltre chiaramente a prove sperimentali, è possibile avvalersi di tre differenti tipologie di modelli di calcolo capaci di simulare i rilasci in atmosfera, i gaussiani, gli integrali e i tridimensionali.
I modelli gaussiani rappresentano i modelli più semplici e più economici dal punto di vista computazionale; essi però non sono in grado di rappresentare il fenomeno nella sua totalità, sono in grado infatti di rappresentare solamente la terza fase, quella di dispersione passiva; per questo motivo, il loro utilizzo andrà integrato con uno degli altri due metodi per la rappresentazione totale del fenomeno studiato.
I modelli integrali riescono a garantire un costo computazionale basso e un livello di dettaglio maggiore rispetto alla categoria precedente. Sono modelli a parametri concentrati fortemente correlati a relazioni semi-empiriche ricavate da analisi sperimentali, grazie alle quali vengono tarati i parametri. La debolezza di questi consiste nel fatto che non sono assolutamente in grado di tener conto di geometrie complesse, ambienti confinati ed ostacoli; per questo motivo vengono utilizzati per un'analisi in campo aperto.
Per quanto l'analisi di condizioni particolari di getto o la presenza di ostacoli (getto "impinged") dunque questi modelli non risultano efficaci. La differenza sostanziale tra un rilascio in campo aperto ed uno in ambiente confinato o in presenza di un ostacolo consiste nel fatto che in quest'ultimo caso la presenza dell'ostacolo provochi una diminuzione della turbolenza del getto con conseguente diminuzione di quantità

d'aria inglobata nel getto stesso; ciò porta dunque ad un'estensione maggiore del getto e quindi ad un'area d'interesse per l'analisi di rischio maggiore.
I modelli tridimensionali rappresentano la categoria di modelli più dettagliata e accurata. Essi sono in grado di compiere un'analisi considerando la presenza di ostacoli e ambienti confinati; risolvono le equazioni di conservazione della massa e di quantità di moto di Navier Stokes in un dominio contenente la geometria del problema. La geometria del problema viene rappresentata attraverso una griglia di calcolo composta da celle e nodi (mesh), sui quali vengono risolte appunto le equazioni di Navier Stokes.
Si può dedurre però come questo comporti un costo computazionale maggiore ed una potenza di calcolo superiore necessaria rispetto ai casi precedenti.
L'analisi e la modellazione di un particolare fenomeno necessità però di alcune competenze e di alcuni accorgimenti necessari per la validità dei dati ottenuti; lo scopo di questo lavoro di tesi è appunto quello di fornire una linea guida per la modellazione fluidodinamica di un getto, partendo da una prima analisi coerente con la geometria originale del caso studio e analizzando gradualmente i risultati ottenuti, confrontando questi ultimi con quelli ottenuti da un modello analitico e da un modello integrale, per costatarne la validità e attendibilità.
Per fare ciò, nel corso di questo lavoro, si è analizzato tramite i modelli tridimensionali una condizione confrontabile a quella di un getto libero; in seguito si è deciso si modificare gradualmente la geometria e le condizioni al contorno, evidenziando come alcuni elementi come ad esempio il terreno siano assolutamente influenzanti sulla fisica e sulla fluidodinamica del fenomeno, portando a risultati, in alcuni casi, del tutto differenti da quelli forniti dalle trattazioni analitiche e da quelle integrali.

NOMENCLATURA

b_1, b_2, b_3	Costanti del modello analitico del TNO
$c_{1\varepsilon}\, c_{2\varepsilon}\, c_{3\varepsilon}$	Costanti del modello k-ε
$\widehat{c_p}$	Calore specifico a pressione costante (J kg^{-1} K)
c_μ	Costante del modello k-ε
d_o	Diametro della sezione di rilascio [m]
d_{eq}	Diametro equivalente
$\mathbf{F}$	Flusso netto entrante
$\mathbf{F_c}$	Flusso convettivo
$\mathbf{F_D}$	Flusso diffusivo
G_b	Termine di generazione di k dovuto alle spinte di galleggiamento
G_k	Termine di generazione di k dovuto ai gradienti di velocità media
h	Entalpia per unità di massa [J kg^{-1}]
K	Costante di Von Karman
k	Energia cinetica turbolenta [$m^2\, s^{-2}$]
K_v	Lunghezza adimensionale della *potential core region* [/]
j_m	Frazione volumetrica del gas a distanza x lungo l'asse del getto [/]
j_o	Frazione volumetrica del gas in prossimità della sezione di rilascio [/]
L	Lunghezza di Monin-Obukhov [m]
LFL	Limite inferiore di infiammabilità
$\dot{m}$	Portata massica [kg s^{-1}]
$\dot{m}_0$	Portata massica in prossimità della sezione di rilascio [kg s^{-1}]
$\underline{p}$	Pressione isotropa [Pa]
P_c	Pressione critica [Pa]
PM	Peso molecolare [g mol^{-1}]
P_R	Pressione ridotta [Pa]
Q	Termine sorgente in forma generica
R	Costante dei gas perfetti [m^3 atm mol^{-1} K]
r_o	Raggio della sezione di rilascio [m]

S	Superficie di integrazione [m^2]
T	Temperatura [K]
t	Tempo [s]
T_c	Temperatura critica
T_R	Temperatura ridotta
u_*	Velocità frizionale turbolenta [$m\ s^{-1}$]
U	Energia interna [J]
U_o	Velocità della sezione di efflusso [m/s]
UFL	Limite suoeriore di infiammabilità
U_m	Velocità del getto in corrispondenza dell'asse [m/s]
v	Vettore velocità [$m\ s^{-1}$]
V	Volume d'integrazione [m^3]
v'	Componente fluttuante della velocità
x	Coordinata longitudinale parallela all'asse del getto [m]
x_c	Lunghezza della *potential core region*
y	Coordinata trasversale [m]
Z	Fattore di compressibilità

Alfabeto Greco

α	Semiampiezza del getto
β	Coefficiente di espansione termica
ε	Velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta [$m^2\ s^{-3}$]
$\bar{\eta}$	Frazione volumetrica media del gas
λ	Conducibilità termica [$J\ m^{-1}\ s^{-1}\ K^{-1}$]
μ	Viscosità dinamica [Pa s]
μ_t	Viscosità dinamica turbolenta [Pa s]
ρ	Densità [$kg\ m^{-3}$]
ρ'_{ga}	Densità relativa tra gas e aria a condizioni ambiente [/]
$\rho'_{0,eq}$	Densità relativa tra gas e aria in prossimità del diametro equivalente. [/]
$\underline{\sigma}$	Tensore degli sforzi interni [Pa]

τ	Tensore degli sforzi viscosi [Pa]
$\overline{\varphi}$	Componente media della generica grandezza turbolenta
φ	Generica grandezza turbolenta per unità di massa
φ'	Componente fluttuante della generica grandezza turbolenta
Φ	Generica grandezza turbolenta
ω	Fattore acentrico di Pitzer

CAPITOLO 1

STATO DELL'ARTE

Per quanto riguarda lo studio e l'analisi di getti, in letteratura questi sono stati analizzati da differenti autori, i quali hanno cercato, tramite modelli analitici o tramite prove sperimentali di determinarne lo sviluppo in base alle condizioni a monte del rilascio.
La complessità del fenomeno è assai elevata, in particolare, come verrà indicato nei paragrafi a seguire, nella zona iniziale dello sviluppo del getto, zona in cui i termini legati all'energia cinetica del fluido sono sicuramente rilevanti.
Per questo diversi autori si sono preoccupati di ridurre il comportamento di un getto in condizioni particolari, come ad esempio un getto supersonico o confinato, a quelle di un getto classico, tramite l'introduzione di alcune grandezze caratteristiche che saranno illustrate più avanti.
Essendo un getto classificato all'interno dei rilasci in ambiente, vengono ora illustrate alcune considerazioni sulle differenti tipologie di rilasci.

1.1 Tipologie di rilasci accidentali

1.1.1 Generalità

Quando si incorre in un rilascio accidentale di una qualunque sostanza tossica o infiammabile occorre distinguere tra un rilascio istantaneo o continuo. Nel primo caso la durata del rilascio risulta molto inferiore al tempo impiegato dalla nube formatasi per raggiungere un eventuale ricettore; nel secondo caso il tempo del

rilascio risulta invece significativo rispetto al tempo impiegato dal pennacchio che si origina per raggiungere un ricettore.
Appartengono a questa seconda tipologia tutti i rilasci ad esempio derivanti da una rottura non catastrofica o da una perdita attraverso una cricca o un foro.

1.1.2 Casistica

Ogniqualvolta venga riscontrato un rilascio, sia esso continuo o istantaneo, questo può presentarsi in diverse modalità, può infatti essere costituito da un rilascio monofase liquido, definito come un rilascio in cui tutta la sostanza rilasciata si trova in fase liquida, da un rilascio monofase gassoso, caratterizzato appunto dalla presenza della sola fase gassosa, o da un bifase.
In questa trattazione viene considerato un rilascio accidentale entro i confini di un impianto di rigassificazione di GNL liquefatto per raffreddamento: poiché il gas naturale è definito come un gas incoercibile, vale a dire in condizioni tali da trovarsi sempre al di sopra del punto critico, rendendo cosi una liquefazione possibile solo per raffreddamento, prima della rigassificazione si trova ad una temperatura pari a -160°C.
I tempi dovuti agli scambi termici sono più lenti di quelli dovuti ai gradienti di pressione, dunque è possibile escludere l'insorgere del fenomeno denominato *flash*, ovvero una brusca evaporazione della miscela dovuta a gradienti di pressione elevati.
A seguito del processo di rigassificazione, l'efflusso è pertanto caratterizzato dalla presenza della sola fase gassosa.

1.1.2.1 Rilascio monofase liquido

Si incorre in questa tipologia di efflusso nei casi in cui la rottura avvenga in un recipiente o in una tubazione nella quale il GNL è stoccato o scorre in modo sottoraffreddato. In questa configurazione, in cui la dispersione è costituita dalla sola fase liquida, viene originata la formazione di una pozza; si deduce quindi come, ai fini

della valutazione e della stima della magnitudo del fenomeno, sia necessario stimare le dimensioni di quest'ultima, per poter a sua volta stimare l'area e le persone che eventualmente possano essere coinvolte nel fenomeno, e per poter progettare un sistema di protezione quali barriere o confinamenti.

Iniziata la dispersione, si ha quindi la formazione di una pozza a contatto col terreno; in questo modo all'avanzare del fenomeno, grazie ai fenomeni di scambi energetici col terreno stesso, la temperatura della pozza stessa aumenta, incrementando così fenomeni di evaporazione di porzioni di gas disperso; l'evaporazione del gas, crea con l'aria circostante una miscela che, a seconda del punto in cui ci troviamo, rientrerà nei limiti di infiammabilità del gas naturale, dando origine così alla possibilità di accensione in presenza di un innesco di qualunque tipo. Risulta così comprensibile l'importanza di un sistema di confinamento che possa così limitare le dimensioni della pozza e quindi limitare le dimensioni della fiamma e dell'incendio generato in presenza dell'innesco.

Nel caso in cui lo sversamento avvenga su altre superfici liquidi, come ad esempio l'acqua, l'evoluzione del fenomeno cambia notevolmente; l'acqua sottostante, a temperature più elevate di quelle di stoccaggio del GNL e con una capacità di scambio termico notevolmente superiore rispetto a quella del terreno usuale, è la causa di un fenomeno di ebollizione molto più rapida e molto più violenta rispetto al caso analizzato precedentemente, noto come BLEVE (Boiling Liquid Expanding Vapor); tale fenomeno si presenta dunque quando la temperatura di ebollizione normale del liquido è molto inferiore alla temperatura alla quale viene scaricato il liquido, portando così ad un elevato surriscaldamento del liquido con conseguente nucleazione omogenea delle bolle di vapore che vengono formate; si arriva perciò al caso di evaporazione molto veloce e violenta del liquido con la conseguente generazione di un esplosione.

Nel caso di un rilascio di GNL liquido sottoraffreddato su acqua, man mano che i fenomeni di scambio energetico procedono, grazie anche alla turbolenza della natura del fenomeno, è possibile la formazione di uno strato di ghiaccio che va ad opporsi ai scambi termici tra GNL e acqua, man mano che lo spessore dello strato di ghiaccio

aumenta; diminuendo gli scambi termici, la portata evaporante di GNL diminuisce, come la velocità di evaporazione stessa.
Per quanto riguarda la velocità di evaporazione, alti valori di questa portano a zone caratterizzate da concentrazioni di GNL all'interno dei limiti di infiammabilità più lontane, e quindi ad una maggiore estensione delle aree interessate.

1.1.2.2 Rilascio monofase gassoso

Nel caso in cui il gas naturale non sia ancora stato liquefatto oppure sia stato rigassificato, in seguito ad una rottura del serbatoio di contenimento o della tubatura di impianto, si può incorrere in un rilascio in cui l'unica fase presente sia quella gassosa.
In questo caso, in base alla durata del fenomeno rapportata ad un tempo caratteristico, è possibile distinguere il caso di un rilascio istantaneo o un rilascio continuo, i quali porteranno rispettivamente alla formazione di una nube o di un pennacchio.
In base alla temperatura del gas rilasciato in atmosfera, questo assumerà o meno un comportamento confrontabile con quello di un gas denso; un gas denso, ovvero un gas con una densità superiore a quella dell'aria, tende, dopo il rilascio, ad allargarsi a ridosso del terreno, portando quindi ad una maggiore espansione nella direzione orizzontale rispetto a quella verticale e ad una stratificazione del gas con una nube decisamente più bassa.
Ciò che si osserva è una miscelazione con l'aria circostante, un inglobamento di questa all'interno del getto formatosi che dà luogo ad un allargamento delle dimensioni della dispersione che, in base al tempo caratteristico del fenomeno, formerà una nube o un pennacchio.

1.2 Rilasci gassosi in atmosfera

L'analisi di un getto generato dalla dispersione di un inquinante rientra nella casistica di un rilascio monofase gassoso.
Un getto viene definito come un rilascio, una dispersione in ambiente caratterizzato da un elevato valore di energia cinetica dovuto alle condizioni a monte del punto di origine del getto stesso.
Durante lo sviluppo del fenomeno il gas rilasciato in atmosfera va a miscelarsi con quest'ultima, la quale, grazie anche alla turbolenza del fenomeno, può provocare il trasporto dell'inquinante, grazie anche all'azione del vento.
Risulta evidente come, ai fini della prevenzione e della sicurezza nell'industria di processo e della tutela delle persone e dell'ambiente, sia di notevole importanza poter stimare la distanza raggiunta da una concentrazione pari al limite di infiammabilità inferiore del gas infiammabile considerato, nel nostro caso gas naturale come già detto precedentemente.

1.3 Getti in letteratura

La dispersione di un inquinante in atmosfera, in condizioni di rilascio continuo, può dare luogo a diverse configurazioni. In letteratura è possibile trovare molte analisi di rilasci in atmosfera di gas infiammabili quali il GNL, volte a prevedere il comportamento di questo al variare del termine sorgente e dell'emissione.
Andare a quantificare e a definire l'emissione significa, oltre definire la sostanza e le condizioni in cui questa viene rilasciata, considerando le sue proprietà chimico fisiche, la fase di rilascio, la pressione e la temperatura, anche la configurazione geometrica e impiantistica dell'ambiente in cui avviene il rilascio.
A questo proposito sono molte le prove sperimentali effettuate per esaminare il comportamento di un getto al variare delle sue condizioni di rilascio e quelle dell'ambiente circostante. I vari dati, raccolti sperimentalmente, sono stati finalizzati alla convalida di un modello analitico e teorico previsionale.

Per quanto concerne le prove sperimentali inoltre, risulta di notevole importanza ricavare dati che siano relativi a diversi contesti, quali ad esempio il campo aperto.
Con il termine campo aperto si intende una configurazione in cui la geometria e l'ambiente circostante non influenzano le condizioni di rilascio e lo sviluppo del getto, in cui sostanzialmente ci si preoccupa solamente di descrivere il comportamento del getto dettato dalla teoria e dall'analisi matematica.
A questo proposito occorre fare qualche precisazione in più riguardo ai getti.
E' già stata fornita nel corso di questa trattazione la definizione di getto; in ambito ingegneristico il getto di un fluido in corrispondenza di un orifizio è stato già largamente studiato, questo perché è interessante analizzare l'interazione tra il getto e l'aria circostante e come questa influisca sullo sviluppo del getto stesso.
In letteratura, il comportamento transitorio del fluido è stato analizzato sotto l'aspetto teorico da Eremin *et al.* [1]; alcune prove sperimentali, focalizzato in particolare sula formazione di onde d'urto, sono state condotte da Golub [2], mentre Korobeishchikov *et al.* [3] si sono occupati dell' espansione di getti supersonici. Analisi numeriche riguardanti lo sviluppo di un getto sono disponibili in letteratura, condotte da Ishii *et al.* [4] per quanto concerne i getti circolari, definiti nei seguenti paragrafi, e da Khaksafard *et al.* [5] per quanto riguarda getti di idrogeno rilasciati in aria considerando un modello di gas reale.
Il caso stazionario, per getti supersonici sottoespansi, ossia per getti confinati ad esempio in un ugello di scarico, è stato largamente studiato da K. Abdol-Hamid e R. Wilmoth [6].
Nella trattazione di K. Abdol-Hamid e R. Wilmoth [6] vengono definite tre zone differenti, la *nearfield zone,* la *transient zone* e la *farfield zone;* la prima, quella più vicina alla zona di origine del getto, in cui il fluido si comporta come se fosse isolato dall'ambiente esterno e il suo sviluppo mostra effetti dovuti alla comprimibilità. Il suo comportamento è assimilabile a un caso stazionario; il parametro di maggior rilievo è il gradiente di pressione tra la zona a monte e quella a valle della sezione di rilascio. Un secondo parametro che sicuramente ha influenza sullo sviluppo del getto e in particolare sulla fase del getto immediatamente a valle del rilascio è il numero di

Mach, numero adimensionale dato dalla velocità del fluido rapportata alla velocità del suono.
La terza zona, la *farfield zone,* viene definita come una zona in cui il getto potrebbe ancora subire effetti legati alla comprimibilità, se il numero di Mach risulta superiore ad un valore di 0,3.
In questa zona il getto può essere analizzato come un getto classico, quindi come un getto formatosi a seguito di un rilascio in aria e in campo aperto.
L'aspetto interessante, che oltre all'analisi di K. Abdol-Hamid e R. Wilmoth [6] viene evidenziato anche nella trattazione di Birch *et al.* [7] è che un getto supersonico può essere analizzato come un getto che si comporta come un getto classico generato virtualmente da una sezione più larga di quella vera.
In letteratura sono inoltre disponibili numerosi articoli e pubblicazioni di getti e scarichi ad alta pressioni in atmosfera a partire da un ugello nel settore aerospaziale; alcuni di questi sono ad opera di Peneau *et al.* [8], per quanto riguarda analisi a transitorio di un getto di idrogeno originato da una cricca di serbatoio, Radulescu e Law [9] allo stesso modo per un'analisi durante il transitorio di getti supersonici e Adamson, Nicholls [10] per quanto concerne la struttura di un getto fortemente sottoespanso originato da un ugello e che si diffonde in aria.
Per quanto concerne la simulazione in CFD di un getto, vi sono due diversi modelli di turbolenza applicabili, il modello k-ε e il modello k-ω, descritti nel capitolo successivo.
In letteratura, Wilcox [11] si è occupato della formulazione del modello k-ω e della convalida di tale modello per i getti. I suoi studio si sono focalizzati sulla determinazione dei valori di *spreading rate,* definito come il rapporto tra la lunghezza perpendicolare e parallela all'asse del getto y/x in cui la velocità del getto risulta essere la metà di quella lungo l'asse.
Attraverso un confronto tra i risultati ottenuti con diversi software e quelli sperimentali della velocità lungo l'asse del getto, Wilcox [11] ha dimostrato come il modello di turbolenza da lui formulato si adatti meglio alla simulazione di un getto.
In tabella 1 vengono riportati i dati da lui raccolti per tre diverse tipologie di getti, definiti nei paragrafi successivi, e per il modello k-ε e il modello k-ω. Si può notare

come i valori del modello k-ε sia vicini agli estremi dell'intervallo sperimentale o persino esterni a tale intervallo, mentre i risultati ricavati con il modello k-ω siano tutti allineati con le prove sperimentali.

Tabella 1 Confronto tra i risultati dei modelli di turbolenza e i risultati sperimentali di Wilcox

Tipologia del getto	Modello k-ε	Modello k-ω	Risultati sperimentali
Getto piano	0.109	0.108	0.1 ÷ 0.110
Getto circolare	0.120	0.094	0.086 ÷ 0.096
Getto radiale	0.094	0.099	0.096 ÷ 0.110

Verrà ora mostrata una panoramica riguardo alle diverse tipologie di getti contestualizzati in campo aperto.

1.4 Free Jet

Un getto viene definito come un rilascio in un determinato ambiente, caratterizzato da un elevata energia cinetica, dovuta dalle condizioni a monte della sezione di rilascio dell'inquinante.

Un *free jet* (getto libero) viene definito come un getto che si propaga nell'aria a partire da un orifizio dove però non vi sono superfici solide o geometrie in grado di influenzare lo sviluppo di questo, e dove la pressione statica all'interno del getto è la medesima dell'ambiente circostante.

In questo caso può dunque essere rilevante verificare il decadimento della velocità lungo l'asse del getto stesso. H.B. Awbi [12] si è preoccupato della descrizione delle diverse tipologie di getti. Per quanto concerne i getti liberi, in figura 1 viene riportata la descrizione di Awbi [12] di ben quattro zone distinte del getto stesso, a partire dalla prima, quella in prossimità dell'orifizio di rilascio, che viene definita *potential core region*, ovvero come quella regione immediatamente a valle della sezione di rilascio in cui la miscelazione tra il gas rilasciato e l'ambiente circostante è assente, tanto da mantenere valori di velocità U_m lungo l'asse del getto pressoché costanti e pari a

quella di efflusso U_0. La lunghezza di tale regione dipende dalla tipologia del foro di rilascio e dalla pressione di stoccaggio, ma solitamente si estende per una lunghezza pari a circa cinque, dieci volte il diametro della sezione di rilascio.
La seconda parte del getto, quella a valle della potential core region, viene definita come *Characteristic decay region;* in tale regione, di flusso stabilizzato, la velocità lungo l'asse del foro U_m comincia gradualmente a ridursi secondo la relazione di proporzionalità (2):

$$\frac{U_m}{U_0} \propto \frac{1}{x^n} \tag{2}$$

dove il termine x indica la distanza dall'origine del getto e n è un indice compreso tra 0.33 e 1. L'estensione di tale regione e il valore di n dipendono dalla geometria e dalle dimensioni del foro di dispersione.
Procedendo nell'evolversi del getto vi è quella zona definita come *axisymmetric decay region*, una regione del getto in cui i fenomeni dominanti sono legati agli alti livelli di turbolenza generati dalla viscosità. In questa regione l'angolo di apertura rimane praticamente costante ed il suo valore dipende dalla geometria della sezione di rilascio.
La regione descritta è la regione predominante del getto, la sua lunghezza si estende per circa un centinaio di diametri; la velocità assiale U_m decade secondo una relazione di proporzionalità inversa rispetto alla distanza dalla sezione di rilascio.

$$\frac{U_m}{U_0} \propto \frac{1}{x} \tag{3}$$

Nella zona finale del getto, la cosiddetta *terminal region* i fenomeni predominanti sono quelli legati alla diffusione in atmosfera dell'inquinante; il getto diventa praticamente indistinguibile dall'aria circostante.
La velocità assiale decade con il quadrato della distanza dalla sorgente.

$$\frac{U_m}{U_0} \propto \frac{1}{x^2} \tag{4}$$

Un getto libero può essere originato da un'apertura circolare, cilindrica, rettangolare. Come precisato più volte in questa trattazione, l'estensione delle quattro regioni qui descritte dipende dalla geometria della sezione di rilascio e dalla pressione di stoccaggio.
In un getto piano, la *potential core region* e la *characteristic decay region* sono le regioni dominanti, mentre per un getto in tre dimensioni, lo sviluppo è fortemente descritto dalla *potential core region* e dalla *axisymmetric decay region*.

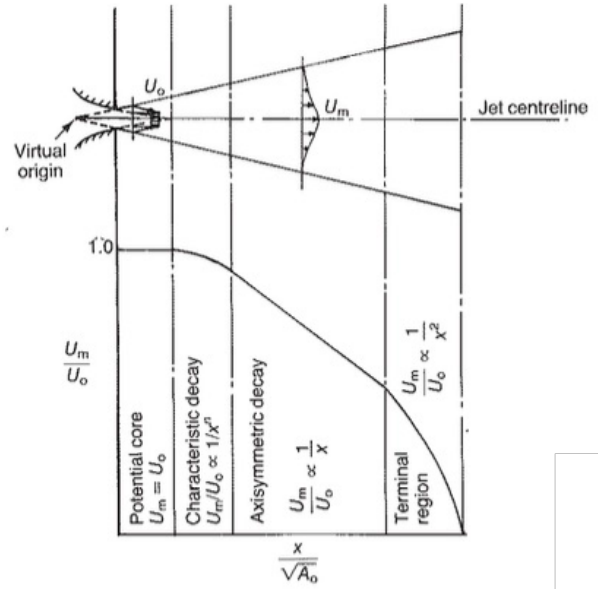

Figura 1 Ipotesi di decadimento della velocità lungo l'asse del getto

1.4.1 Getti circolari

Un getto generato da una sezione circolare viene denominato *getto circolare*. Tale getto risulta assialsimmetrico e senza la presenza di quella che è stata definita *characteristic decay region*.

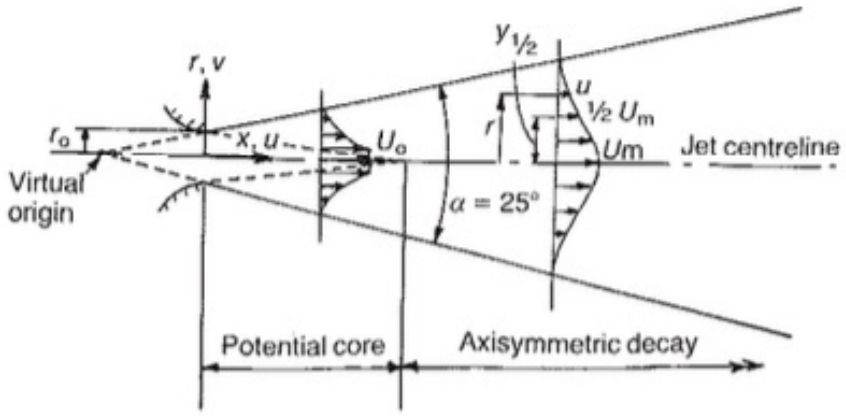

Figura 2 Rappresentazione di un getto circolare

Per tale tipologia di getti, come viene suggerito nella trattazione di Awbi [12], l'equazione di quantità di moto di Navier Stokes nella direzione parallela all'asse del getto viene riscritta in coordinate cilindriche, come l'equazione di continuità.
Al fine di quantificare la distanza di danno raggiunta da un getto, gli studi eseguiti da Awbi [12] vogliono determinare, dall'integrazione dell'equazione di quantità di moto e di continuità, un'espressione per descrivere il decadimento della velocità lungo l'asse del getto della forma:

$$\frac{U_m}{U_0} = \frac{K_v}{\frac{x}{d_0}} \tag{5}$$

dove il valore della costante K_v dipende dalla teoria utilizzata; viene riportata qui di seguito una tabella riassuntiva dei diversi valori.

Tabella 2 Valori della costante K_v

	K_v
Tollmien	**7.32**
Goertler	**5.75**
Rajaratnam	**6.3**

I valori della costante K_v sono valori ricavati per via sperimentale. Tale costante viene poi relazionata alla lunghezza x_c della *potential core region,* tramite la relazione

$$K_v = \frac{x_c}{d_0} \tag{6}$$

rappresenta pertanto il valore della lunghezza x_c adimensionalizzata sul diametro della sezione di rilascio.
Effettuando altre prove sperimentali, Baturin [13] ha ricavato l'equazione per il decadimento della velocità lungo l'asse del getto per getti assialsimmetrici, in cui si tiene conto della geometria dell'ugello di scarico tramite un parametro costante a. Maggiore è il valore di tale costante, più rapido è il decadimento della velocità lungo l'asse del getto. Un secondo parametro da considerare è l'angolo di semiapertura del getto α; i suoi valori variano, come per il caso precedente, per differenti configurazioni geometriche della sorgente di rilascio.
Il diametro del getto, ad una determinata distanza x dall'origine, noto il diametro della sezione di rilascio e l'angolo della semiampiezza, è definito come

$$d_{jet} = 2x \tan \alpha + d_0 \tag{7}$$

E' in questo modo possibile stimare analiticamente le dimensioni di un getto assialsimmetrico come quello circolare.

1.4.2 Getto piano

Viene definito getto piano un getto originato da una fessura rettangolare infinitamente lunga in modo che l'unica variazione delle caratteristiche e delle proprietà del getto avviene nella direzione del piano normale alla fessura di rilascio.

Una raccolta dei profili di velocità è stata eseguita da Förthmann [14] per una fessura di altezza 30 mm e lunghezza 650 mm con un rapporto b/h pari a 21.7, rapporto che appunto permette di considerare il getto come piano.
Tale raccolta di profili di velocità è stata poi rappresentata in forma dimensionale e adimensionale, come mostra la figura 4.

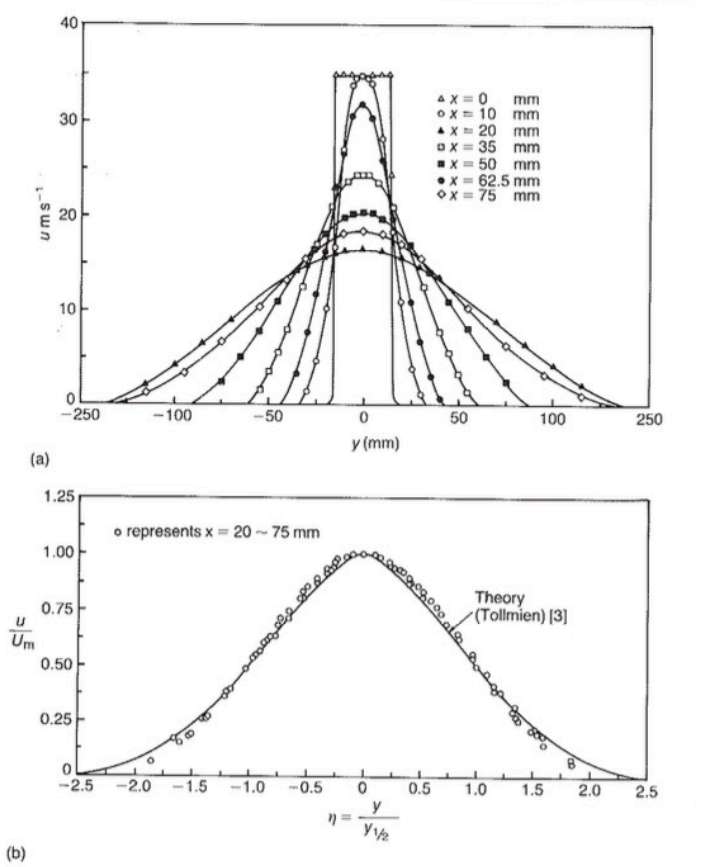

Figura 3 Profili di velocità per un getto piano in forma dimensionale (a) e adimensionale (b)

1.4.3 Getto radiale

Un getto radiale è un getto originato dal flusso dal flusso radiale di un fluido che scorre all'interno di due aperture molto ravvicinate l'una all'altra.
In tale configurazione, lo sviluppo del getto nella direzione radiale e nella direzione y è lo stesso già visto per le altre tipologie di getti, mentre il profilo di velocità è il medesimo riscontrato per i getti piani.

1.5 Ground jet

E' possibile riscontrare questa tipologia di getti quando il getto di un fluido originato da un orifizio è delimitato da un lato da una superficie come ad esempio il terreno e la velocità in corrispondenza dell'uscita è parallela alla superficie stessa.
Le regioni di decadimento della velocità, come per i *free jet*, sono tre e sono anche in questo caso caratterizzate da proprietà e sviluppi simili ai casi precedenti.

1.5.1 Getto piano

Come nel caso del getto piano presentato per i free jets, anche in questa seconda casistica si definisce getto piano un getto generato da un orifizio di sezione rettangolare infinitamente lunga, in cui la variazione più significativa delle caratteristiche del getto avviene lungo la direzione normale al piano della sezione di rilascio.
Come nel caso precedente il parametro fondamentale è dato dal rapporto b/h, ovvero dal rapporto tra la larghezza del foro e l'altezza della fessura.
Le aree in cui avviene il decadimento della velocità del getto sono solamente due, come mostrato in figura 4,

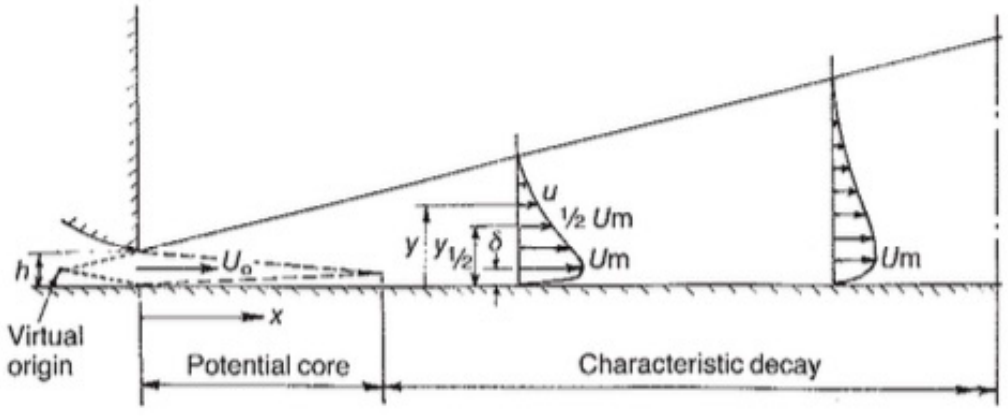

Figura 4 Regioni caratteristiche per un getto piano confinato

Anche in questo caso vi è una raccolta di dati raccolti da Förthmann [14] per una fessura di altezza 30 mm e lunghezza 650 mm con un rapporto b/h pari a 21.7, con un lato della fessura confinato da un parete chiaramente.

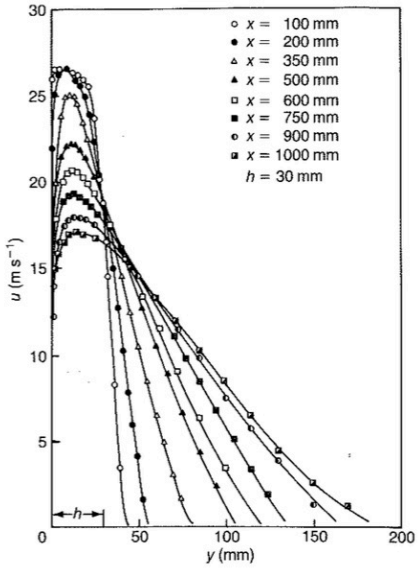

Figura 5 Profili di velocità ricavati per un getto piano

Si può notare dalla figura 5 come i profili siano tutti simili in tutte le sezioni perpendicolari al muro di confinamento.

Rajaratnam [15] ha proposto invece un confronto tra i precedenti dati sperimentali con due espressioni empiriche che considerano la velocità adimensionalizzata, come raffigurato di seguito

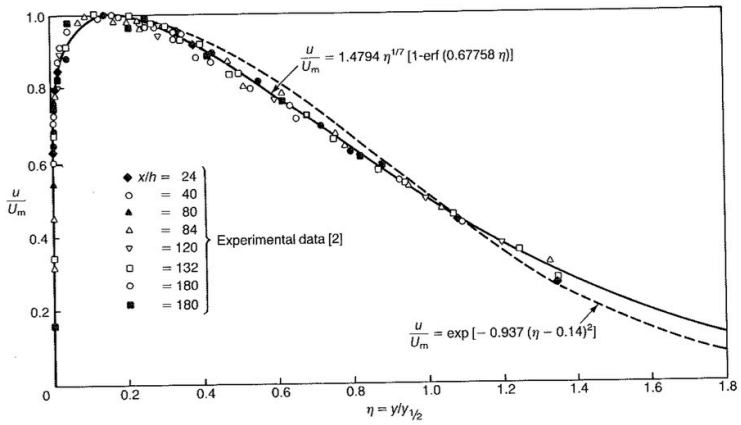

Figura 6 Profili di velocità adimensionali per un getto piano

1.5.2 Getti radiali

Anche in questo caso valgono le considerazioni svolte per il caso precedente. Il decadimento della velocità nella direzione radiale può essere espresso tramite l'espressione:

$$\frac{U_m}{U_0} = \left[\frac{3.5}{\frac{r}{h}}\right]\sqrt{\frac{r_0}{h}} \tag{8}$$

I risultati ottenuti sono molto simili a quelli ottenuti al caso analizzato per i free jets.

1.6 Diametro equivalente

In letteratura sono presenti alcuni articoli e studi analitici che si preoccupano di descrivere in maniera teorica il decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto.

Birch [10] si è dedicato allo studio analitico di un free jet per riuscire a ricavare l'espressione analitica della concentrazione lungo l'asse di quest'ultimo, analizzando come inquinante rilasciato gas naturale.

Dai suoi studi si è notato che la distanza raggiunta dal getto fino al decadimento della concentrazione è direttamente proporzionale al diametro della sezione di rilascio, e inversamente proporzionale alla radice quadrata della densità della sostanza di rilascio; l'aspetto più interessante è stato che tale distanza è indipendente dalla velocità del getto.

Per casi contraddistinti da alte pressioni, la velocità di fuoriuscita del getto rimane in condizioni chocked, per valori quindi corrispondenti a quelli del regime sonico, ma è possibile costatare un valore maggiore della pressione in uscita rispetto a quella dell'ambiente, portando così come risultato a un'espansione del getto a valle dell'ugello di rilascio.

L'andamento della concentrazione rimane comunque il medesimo di quello prodotto da una sezione di diametro maggiore, potendo così parlare di uno *pseudodiametro,* ossia un diametro maggiore posto a valle della sezione di rilascio.

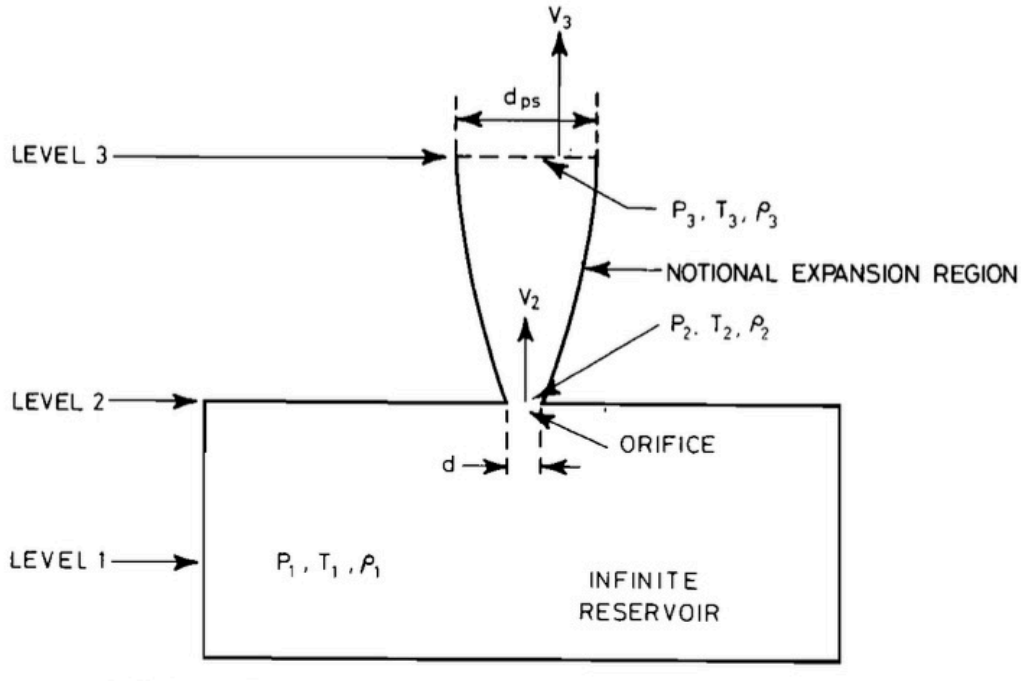

Figura 7 Rappresentazione dello pseudodiametro

Si evince in questo modo come un getto sonico o supersonico, grazie all'introduzione di un diametro equivalente, possa essere ricondotto ad un getto subsonico, traslato di una lunghezza pari a quella che era stata definita *potential core region*. La derivazione di tale diametro per un gas naturale porta ad una proporzionalità tra questo e la radice quadrata della pressione di scarico

Per un getto libero circolare a pressioni inferiori rispetto a quella critica, ovvero pressioni inferiore a quei valori che conducono ad una velocità sonica del getto, la concentrazione lungo l'asse del getto segue un andamento iperbolico decrescente, secondo l'espressione ricavata da Birch [10] e riportata di seguito.

$$\bar{\eta} = \frac{kd_0}{z + a}\left(\frac{\rho_a}{\rho_g}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{9}$$

Il termine *a* indica la distanza dall'origine virtuale, k è una costante di decadimento lungo l'asse del getto e z è la distanza a valle, questo perché il modello analitico considera un getto generato da una sorgente puntiforme, che rispetto al caso reale, costituisce un punto virtuale posto a monte della sezione di rilascio.
Il termine contenente il rapporto tra la densità del gas e quella atmosferica è stato inserito per rendere la relazione universalmente applicabile.
Nel caso in cui vi siano le condizioni per poter applicare le considerazioni fatte sul diametro equivalente, nell'espressione (9) possiamo sostituire il termine d_o con il termine d_{ps} .

1.7 Decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto libero

La trattazione portata avanti da Birch [10], dimostra in sostanza che getti supersonici si comportano come getti subsonici considerando al posto del diametro della sezione di rilascio quello equivalente calcolato come mostrato precedentemente.
Il TNO [16] invece si è occupato della derivazione analitica della concentrazione lungo l'asse del getto

$$j_m = \frac{\frac{b_1 + b_2}{b_1}}{0.32\frac{x}{d_{eq}}\frac{\rho'_{g,a}}{\sqrt{\rho'_{0,eq}}} + 1 - \rho'_{g,a}} \tag{10}$$

dove il valore delle costanti b_1, b_2 e b_3 definito come

$$b_1 = 50.5 + 48.2\,\rho'_{g,a} - 9.95(\rho'_{g,a})^2 \tag{11}$$

$$b_2 = 23 + 41\rho'_{g,a} \tag{12}$$

$$b_3 = \frac{y}{x + x'} \tag{13}$$

in cui $\rho'_{g,a}$ rappresenta la densità relativa del gas rispetto all'aria e b_3 il rapporto tra la distanza dall'asse del getto e quella dall'origine apparente

1.8 Simulazione numerica di un getto

La simulazione numerica di un getto è stata oggetto di studio di Yuen *et al.* [17].
La trattazione proposta dagli autori sopra citati aveva più precisamente come obiettivo la simulazione di un *jet fire*, ovvero un rilascio tramite un getto di una sostanza infiammabile in presenza di un innesco, capace in tale contesto di causare appunto un getto incendiato denominato appunto *jet fire,* poiché ai fini della sicurezza e della prevenzione si voleva in tale trattazione stimare le distanze raggiunte dal fenomeno studiato.
Il problema è stato affrontato tramite un approccio *LES (Large Eddy Simulation)*, ovvero un approccio basato sul filtraggio delle equazioni di conservazione e di trasporto. L'approccio *LES* si basa sulla scelta di un opportuno filtro, contraddistinto da una certa ampiezza, con lo scopo di risolvere nella simulazione tutti quei vortici turbolenti con una dimensione caratteristica maggiore all'ampiezza del filtro.

Lo studio affrontato da Yuen *et al.* [17] si è basato sulla costruzione della geometria e della griglia di calcolo (mesh); la scelta della griglia è stata affrontata a valle di un'analisi di sensitività, sono state perciò costruite tre differenti tipologie di griglie di calcolo, ognuna con differenti infittimenti.
Si è notato da tale analisi che innanzitutto, all'infittirsi della mesh i tempi di calcolo sono aumentati notevolmente, e che al modificarsi della griglia, anche i risultati portavano ad avere alcune variazioni.
Questo vuole focalizzare l'attenzione del lettore riguardo la dipendenza della simulazione dalla griglia di calcolo utilizzata e la necessità dunque di conoscere le regole di buona pratica per la costruzione della mesh.

CAPITOLO 2

METODI DI MODELLAZIONE

Nell'ambito della modellazione di un getto, sono disponibili diversi modelli da applicare, i modelli analitici, i modelli integrali e i modelli CFD.
I modelli analitici si occupano di una descrizione matematica del fenomeno, ricavando correlazione basate su parametri e costanti ricavate e convalidate sperimentalmente.
I modelli integrali si basano sulla risoluzione di equazioni differenziali ordinarie; infine i modelli CFD risolvono direttamente le equazioni di bilancio di massa, quantità di moto ed energia, portando così ad una maggiore accuratezza della descrizione del fenomeno.

2.1 Parametri per la descrizione analitica di un getto

Una possibile descrizione di un *free jet* è riportata nello *Yellow book* del TNO [16]; l'analisi del TNO [16] risulta adattabile al caso in cui si voglia determinare il comportamento del getto a partire dalla sezione avente il diametro pari al diametro equivalente. Per la descrizione sono necessarie alcune variabili caratteristiche, quali il rapporto tra la concentrazione lungo l'asse del getto e il valore di concentrazione in corrispondenza della sezione di rilascio $\frac{j_m}{j_0}$, il rapporto tra la velocità lungo l'asse del getto e il valore della velocità al rilascio $\frac{U_m}{U_0}$, la distribuzione di concentrazione e velocità in un piano orizzontale all'asse del getto stesso e l'origine virtuale x', ovvero un origine puntiforme del getto in grado di determinare il medesimo angolo di semiapertura del getto reale avente origine nella sezione di rilascio.

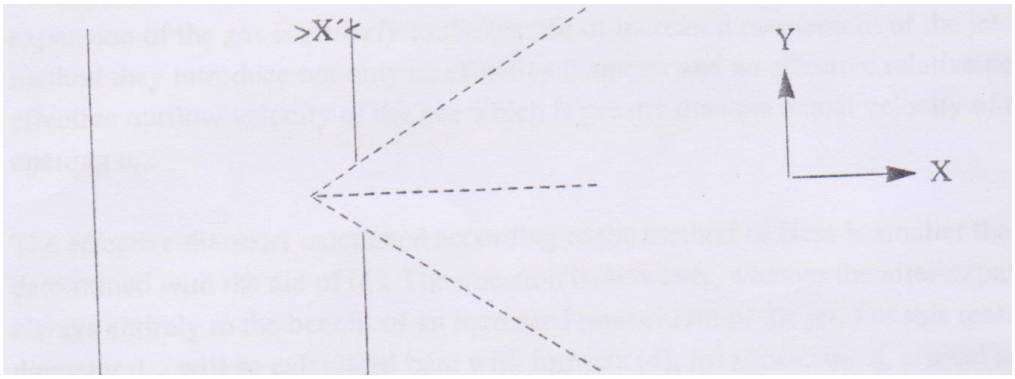

Figura 8 Posizione dell'origine apparente del getto

L'andamento della concentrazione in un piano perpendicolare all'asse del getto può essere ben rappresentata da una funzione esponenziale del tipo

$$\frac{j_{x,y}}{j_m} = e^{-b_2 b_3^2} \tag{14}$$

mentre l'andamento della velocità assume la forma secondo l'equazione (15) qui di seguito riportata

$$\frac{U_{x,y}}{U_m} = e^{-b_1 b_3^2} \tag{15}$$

Per l'equazione (14) e per l'equazione (15) la dipendenza dalla distanza x dall'origine del getto è contenuta nella costante b_3, come si può notare dall'espressione (18).
I valori delle costanti b_1 e b_2 dipendono dal gas considerato nella trattazione poiché dipendono dalla densità del gas in condizioni atmosferiche $\rho_{g,a}$, come mostrato dalle espressioni (16) e (17)

$$b_1 = 50.5 + 48.2\,\rho'_{g,a} - 9.95(\rho'_{g,a})^2 \tag{16}$$

$$b_2 = 23 + 41\rho'_{g,a} \tag{17}$$

$$b_3 = \frac{y}{x + x'} \tag{18}$$

La costante b_3 rappresenta il rapporto tra la distanza dall'asse del getto e l'origine apparente.
Ricou e Spalding [18] hanno dimostrato che il rapporto tra la portata massiva in un piano perpendicolare all'asse del getto e il valore iniziale della portata massiva, dipende strettamente dal rapporto $\frac{x}{d_0}$ e dalla densità relativa $\rho'_{g,o}$, rapporto tra la densità del gas alle condizioni di fuoriuscita e la densità dell'aria in condizioni ambiente. Questo perché la velocità è inversamente proporzionale alla distanza dalla sezione di rilascio e la portata massiva dipende dalla velocità. Si può dunque dedurre la dipendenza sopra descritta.
La relazione (19) riporta ciò appena descritto.

$$\frac{\dot{m}}{\dot{m}_0} = 0.32 \frac{x}{d_0} \left[\frac{1}{\rho'_{g,o}}\right]^{0.5} \tag{19}$$

La densità relativa del gas alle condizioni di rilascio può divergere dalla densità relativa del gas lungo il getto; ciò accade poiché la pressione del gas in corrispondenza della sezione di rilascio è differente dalla pressione atmosferica, oppure perché la temperatura di rilascio differisce da quella dell'ambiente circostante, essendo la densità una proprietà fisica specifica del materiale e funzione della pressione e della temperatura.
In quest'ultimo caso si assume che l'equilibrio termico sia raggiunto talmente velocemente che la temperatura del getto sia la stessa dell'ambiente circostante.
Per tener conto di tale differenza nella densità del gas alla sezione di rilascio, vengono introdotti il diametro equivalente, in corrispondenza del quale la pressione del getto è pari a quella atmosferica, e una densità relativa equivalente.

$$d_{eq} = d_0 \sqrt{\frac{\rho'_{g,o}}{\rho'_{o,eq}}} \tag{20}$$

Lo scopo dell'introduzione di queste nuove grandezze è una semplificazione del problema, potendo così considerare la densità come una funzione della sola temperatura e non della pressione.
L'equazione (19) allora assume la forma

$$\frac{\dot{m}}{\dot{m}_0} = 0.32 \frac{x}{d_{eq}} \left[\frac{1}{\rho'_{o,eq}}\right]^{0.5} \tag{21}$$

L'espressione della concentrazione viene riportata allora come segue,

$$j_m = \frac{\frac{b_1 + b_2}{b_1}}{0.32 \frac{x}{d_{eq}} \frac{\rho'_{g,a}}{\sqrt{\rho'_{0,eq}}} + 1 - \rho'_{g,a}} \tag{22}$$

Per casi ad alte pressioni, la velocità del getto in prossimità della sezione di rilascio rimane in condizioni chocked, per valori quindi corrispondenti a quelli del regime sonico, ma è possibile constatare un incremento della pressione in uscita rispetto a quella dell'ambiente, portando così come risultato un'espansione del getto a valle dell'ugello di rilascio.
L'andamento della concentrazione rimane comunque il medesimo di quello prodotto da una sezione di diametro maggiore, potendo così parlare di uno *pseudodiametro,* ovvero un diametro maggiore posto a valle della sezione di rilascio.
Come già illustrato nel capitolo precedente un getto sonico o supersonico, mediante la definizione di un diametro equivalente, può essere ricondotto ad un getto subsonico, caratterizzato da un'origine traslata di una lunghezza pari a quella della

potential core region. La derivazione di tale diametro è riportata nell'espressione che segue

$$\frac{d_{ps}}{d_0} = \sqrt{\left(0.582 C_D \frac{P_0}{P_a}\right)} \tag{23}$$

dove il termine P_0 indica la pressione a monte del getto, quella di stoccaggio, e il termine P_a rappresenta la pressione dell'ambiente circostante. Il termine C_D rappresenta un coefficiente di efflusso che tiene conto delle perdite di carico nella fuoriuscita del getto.

L'espressione sopra riportata è stata ricavata considerando γ, rapporto tra il calore specifico a pressione costante e quello a volume costante, riferita al gas naturale, con un valore pari a 1.35.

Va inoltre precisato che il valore della costante 0.582 non dimostra una dipendenza elevata dalle variazioni di γ, infatti per γ pari a 1.3 il valore della costante diventa 0.585, per γ pari a 1.4 la costante diventa 0.579.

Il decadimento del getto, può essere descritto anche dalla trattazione di Awbi [12], già illustrata nel capitolo 1; viene dunque considerata l'equazione (24)

$$\frac{U_m}{U_0} = \frac{K_v}{\frac{x}{d_0}} \tag{24}$$

dove il termine U_m indica la velocità in corrispondenza dell'asse del getto, U_0 è il valore della velocità sulla sezione di rilascio della sostanza inquinante, x è la distanza dalla sezione di origine, d_0 il diametro della sezione di uscita e K_v una costante che rappresenta la lunghezza adimensionalizzata della *potential core region*, definita come

$$K_v = \frac{x_c}{d_0} \tag{25}$$

dove x_c è l'estensione della *potential core region*. La lunghezza adimensionalizzata viene introdotta per rendere l'espressione (24) valida per il caso più generale possibile e quindi indipendente dal caso studio.

Il valore della costante K_v dipende dalla teoria utilizzata; i suoi valori sono riportati nella tabella 2, presentata nel capitolo precedente e riportata nuovamente qui sotto per comodità del lettore

Tabella 2 Valori della costante K_v

	K_v
Tollmien	**7.32**
Goertler	**5.75**
Rajaratnam	**6.3**

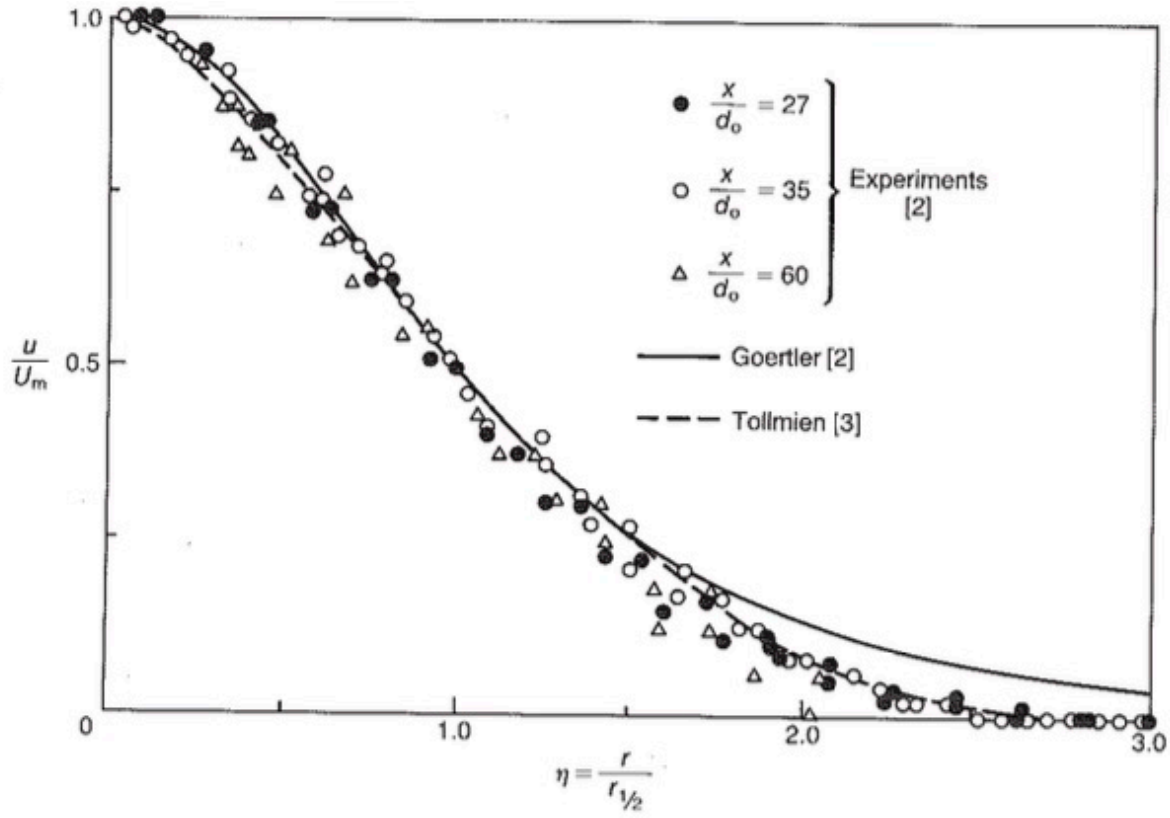

Figura 9 Profili di velocità adimensionali per un getto circolare

Con le relazioni analitiche qui scritte è possibile ricavare la concentrazione e la velocità di un getto in funzione della distanza dal punto di rilascio.
Un altro parametro fondamentale nella descrizione delle dimensioni del getto stesso è dato dall'angolo della semiampiezza. Noto il suo valore e quello del diametro della sezione di rilascio possiamo stimare il diametro del getto ad una determinata distanza tramite l'espressione (26)

$$d_{jet} = 2x \tan \alpha + d_0 \tag{26}$$

2.2 Modelli integrali

I modelli integrali hanno come obiettivo la risoluzione delle equazioni di bilancio di materia, quantità di moto ed energia andando a considerare alcune semplificazioni; tali semplificazioni originano un sistema di equazioni alle derivate ordinarie che non risultano però risolvibili analiticamente; si può dedurre allora come la loro risoluzione sia affidata all'integrazione numerica, la quale prevede la determinazione di un volume denominato *volume di controllo* per il quale vengono scritte le equazioni sopra citate.

Il loro grado di avanzamento rispetto ai modelli gaussiani fa si che questi possano essere impiegati per la descrizione del termine sorgente e della fase intermedia caratterizzata dalle forze di galleggiamento di un rilascio continuo ad esempio in atmosfera.

La loro più grande limitazione è dettata dall'incapacità di considerare geometrie complesse e ambienti confinati; inoltre il loro utilizzo è basato su parametri e costanti la cui determinazione e taratura è stata eseguita per via sperimentale, rendendo il modello utilizzabile ed applicabile solo per quei casi studiati in condizioni simili o confrontabili con quelle dell'esperimento.

Per quanto riguarda l'analisi di un getto tramite i modelli integrali, questi tengono conto dell'entrainment di aria all'interno del getto attraverso tre parametri, α_1, α_2 e α_3; il primo parametro viene riferito alla turbolenza del getto, il secondo al contributo dovuto alle forze di galleggiamento e il terzo alla turbolenza dell'aria circostante.

Si può dunque capire come al di fuori di tali condizioni, i modelli integrali siano non affidabili e come la loro validità decada del tutto.

Nel caso di un rilascio continuo in atmosfera, la fase finale della dispersione, quella di dispersione passiva, non è modellabile o descrivibile tramite i modelli integrali, bensì tramite i modelli gaussiani, da cui il motivo di accoppiare in ogni caso e contesto i modelli integrali con quelli gaussiani.

Il lavoro di tesi qui proposto ha utilizzato, come rappresentante dei modelli integrali, il software di simulazione PHAST 6.

2.3 Modelli CFD

I modelli CFD o tridimensionali, sono quei modelli che basano il loro approccio e il loro sviluppo sulla risoluzione delle equazioni di bilancio di materia, energia e quantità di moto senza alcuna semplificazione. Si può dedurre da tale affermazione come il livello di dettaglio raggiunto dalla CFD (fluidodinamica computazionale) sia assolutamente elevato e approfondito; si può dedurre inoltre, come tale livello avanzato di dettaglio comporti anche un costo elevato in termini di risorse computazionali.

Tali modelli si occupano anche della risoluzione delle equazioni di turbolenza che caratterizzano il problema considerato, potendo considerare anche tutti quei casi con geometrie complesse.

Il loro impiego è assolutamente applicabile ad ogni analisi e ad ogni caso, potendo includere anche condizioni atmosferiche particolari.

Come già detto, a causa di questa loro vasta applicabilità e del livello di dettaglio elevato raggiungibile, la potenza di calcolo richiesta da tali modelli risulta onerosa.

La convergenza alla soluzione ricercata non è tuttavia sempre garantita, così come la stabilità della soluzione ottenuta.

Per la vasta gamma di funzionalità e capacità di tali modelli, è richiesto personale formato ed esperto per il loro utilizzo.

Verrà di seguito riportata una trattazione delle equazioni di bilancio che tali modelli si occupano di risolvere e le varie metodologie di risoluzione di tali equazioni.

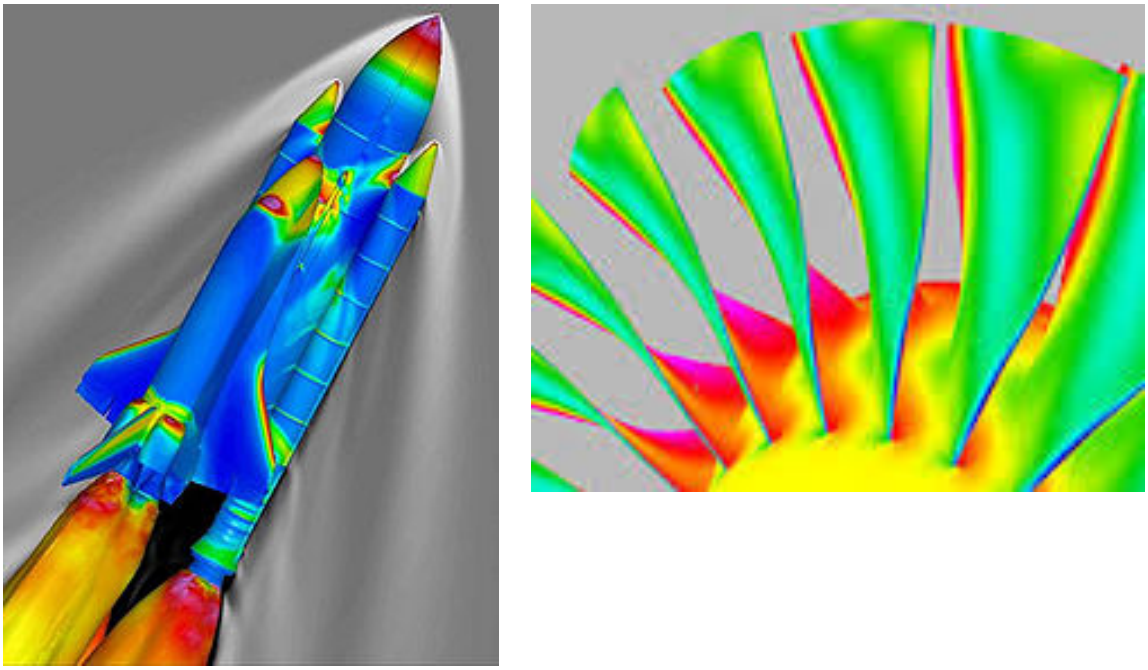

Figura 10 Esempi applicativi della Fluidodinamica Computazionale (CFD)

2.3.1 Equazioni di bilancio

Le equazioni considerate dai modelli CFD sono appunto equazioni di bilancio di materia, energia e quantità di moto.

Tali modelli risolvono qualunque problema andando a risolvere numericamente tali equazioni; per questa loro capacità, anche un fenomeno come quello di una dispersione verrà risolto numericamente tramite la risoluzione di tali equazioni.

Per svolgere tale risoluzione, va dunque considerata la scrittura di tali equazioni, scrittura che prevede la determinazione di una grandezza scalare per unità di volume Φ, che agisce in un volume arbitrario denominato *volume di controllo* V, fissato da una superficie chiusa S, all'interno del quale il valore locale di Φ dipende dall'effetto di alcuni flussi F, dal valore assunto nei punti intorno e dal valore di un eventuale contributo dovuto alla presenza di un termine sorgente Q.

La forma più generale possibile è determinata dalla variazione nel tempo del termine scalare Φ in relazione al volume V, dai flussi entranti ed uscenti attraverso al

superficie S e dalla presenza o meno del termine sorgente Q, il quale può essere suddiviso in termine di sorgente di superficie Q_s e termine di sorgente di volume Q_v.
La forma generale dell'equazione di bilancio allora è data da:

$$\frac{d}{dt}\int_V \Phi\, dV + \oint_S F\, dS = \int_V Q_V dV + \oint_S Q_S\, dS \tag{27}$$

tramite l'ausilio del Teorema della divergenza, la forma (27) diventa così scrivibile:

$$\frac{d\Phi}{dt} + \nabla F = S_V + \nabla S_S \tag{28}$$

Il termine associato ai flussi F può essere scomposto in due diversi contributi, F_C, associato ai flussi convettivi, e il termine F_D, associato ai flussi diffusivi, definiti come:

$$F_C = v\Phi \tag{29}$$

$$F_D = -\Gamma_\varphi \nabla\varphi \tag{30}$$

in cui v è il vettore velocità, φ è tale da $\Phi=\rho\varphi$ dove ρ è la densità e il termine Γ_φ rappresenta la diffusività di φ.
Riscrivendo la (28) considerando le espressioni (29) e (30) si ottiene:

$$\frac{d\rho\varphi}{dt} + \nabla(v\rho\varphi) = \nabla(\Gamma_\varphi \nabla\varphi) + S_V + \nabla S_S \tag{31}$$

Nel caso in cui la grandezza che si conserva non sia più uno scalare ma sia di natura vettoriale, l'espressione (31) si modifica in modo che i termini scalari diventino termini vettoriali mentre quelli vettoriali diventino di natura tensoriale.

2.3.2 Massa

L'equazione di bilancio di massa, detta anche equazione di continuità, deriva dalla forma generale (31) precedentemente esposta e considerate alcune semplificazioni quali l'assenza del termine sorgente e il flusso diffusivo posto pari a zero; la grandezza scalare considerata nella scrittura di tale equazione è data dalla densità della specie ρ.
L'equazione (27) in forma integrale assume dunque la forma:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho dV + \oint_S \rho v dS = 0 \tag{32}$$

mentre in forma differenziale l'equazione (31) diventa:

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla(\rho v) = 0 \tag{33}$$

2.3.3 Equazione di quantità di moto

La seconda legge di Newton *F=ma* può essere riscritta affermando che la derivata della quantità di moto di un determinato sistema è pari alla risultante delle forze esterne agenti su quel sistema.
Questa è dunque la premessa con la quale è stata ricavata la seconda equazione di Navier Stokes, detta anche equazione di quantità di moto.
Le forze agenti su un sistema possono essere fondamentalmente di due tipologie, forze interne di superficie f_i e forze esterne di volume f_e; le prime sono legate alla natura del fluido, derivano infatti dalle proprietà di deformazione interna del fluido e a come questa è relazionata agli sforzi interni $\underline{\sigma}$.
Considerando il fluido come un fluido newtoniano, è possibile esprimere gli sforzi interni come:

$$\underline{\sigma} = -\underline{p} + \underline{\tau} \tag{34}$$

in cui il termine $\underline{p}$ rappresenta la componente relativa alla pressione isotropica, ovvero indipendente dalla direzione, e $\underline{\tau}$ costituisce il tensore degli sforzi dovuti alla viscosità, generato dunque dal movimento del fluido dtesso.
Il tensore degli sforzi viscosi $\underline{\tau}$ è esprimibile a sua volta tramite la relazione di Stokes come:

$$\underline{\tau} = \mu \left[(\nabla v + \nabla v^T) - \tfrac{2}{3} \nabla v \mathrm{I} \right] \tag{35}$$

Nell'espressione (35) il termine μ indica la viscosità dinamica del fluido. Nella derivazione dell'equazione di quantità di moto, viene ipotizzata, come nel caso dell'equazione di continuità, l'assenza del termine diffusivo.
La grandezza per la quale viene scritta l'equazione di bilancio è data dal prodotto della densità ρ per la velocità v; la forma integrale del bilancio assume allora la forma:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho v dV + \oint_S \rho v \, v dS = -\oint_S \underline{p} dS + \oint_S \underline{\tau} dS + \int_V \rho f_e dV \tag{36}$$

Tramite l'applicazione del teorema della divergenza, l'equazione (36) diventa:

$$\frac{d(\rho v)}{dt} + \nabla(\rho v \, v) = -\nabla \underline{p} + \nabla \underline{\tau} + \rho g \tag{37}$$

scritta nella forma differenziale.
L'equazione di continuità accoppiata a quella di quantità di moto costituiscono il set di equazioni noto come *equazioni di Navier Stokes*.

2.3.4 Equazione dell'energia

L'equazione di bilancio energetico si estende a tutte le possibili forme di energia che possono più o meno accumularsi all'interno del sistema considerato, essere trasferite o generate al suo interno.
Deriva dalla stesura del primo principio della termodinamica

$$\Delta U = Q - L \tag{38}$$

Dove il termine ΔU indica la variazione di energia interna di un dato sistema, il termine Q indica il calore scambiato ed L indica il lavoro netto scambiato sul sistema.
Le forme energetiche da considerare nella scrittura di tale equazione sono *l'energia interna*, ovvero quella forma di energia associata all'energia propria che possiede ogni molecola e alle interazioni esistenti tra tutte le molecole del sistema considerato, *l'energia cinetica*, l'energia quindi associata alla velocità di un corpo, e *l'energia potenziale*, ovvero quell'energia associata alla posizione di un corpo all'interno di un campo di forze come quello gravitazionale.
Anche in questo caso, come per i due precedenti, vengono assunte alcune ipotesi semplificative quali l'entalpia h come unica forma d'energia considerata, l'assenza dei termini sorgente, generalmente associati alla presenza di reazioni chimiche, e l'assenza di un termine legato al lavoro svolto dalle forze interne ed esterne.
La stesura del bilancio energetico si ottiene impostando come grandezza ϕ il prodotto tra la densità ρ e l'entalpia h.
Il termine convettivo viene riscritto come:

$$F_c = \rho v h \tag{39}$$

quello diffusivo come:

$$F_D = -\Gamma_h \nabla \rho h \tag{40}$$

La forma integrale del bilancio energetico assume la forma:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho h dV + \oint_S \rho h v dS = \oint_S \Gamma_h \nabla \rho h dS \tag{41}$$

Il termine entalpico può essere riscritto per definizione come il prodotto tra il calore specifico a pressione costante $\widehat{c_p}$ e la temperatura T; l'espressione (41) allora diventa:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho \widehat{c_p} T dV + \oint_S \rho \widehat{c_p} T v dS = \oint_S \lambda \nabla T dS \tag{42}$$

dove il temine $\lambda = \Gamma_h \rho \widehat{c_p}$ rappresenta la conducibilità termica del fluido.
Tramite l'applicazione del teorema della divergenza, il bilancio (42) diventa in forma differenziale:

$$\frac{d(\rho \hat{c}_p T)}{dt} + \nabla\left(\rho \widehat{c_p} T v\right) = \nabla(\lambda \nabla T) \tag{43}$$

2.4 Turbolenza

Il moto di un fluido può, a seconda della velocità e della geometria dell'ambiente circostante essere caratterizzato da due differenti tipologie di regime, quello laminare e quello turbolento.

Il regime turbolento, che caratterizza una buona parte di flussi e di moti di fluidi, è caratterizzato da alcune proprietà, le quali necessitano di un approfondimento in questa trattazione.
Un fenomeno turbolento risulta rappresentato da una complessità molto elevata; il suo sviluppo dipende dal tempo, risulta perciò fortemente non stazionario; cisò significa quindi che qualunque grandezza caratteristica, come potrebbe essere la

velocità, rapportata in un grafico tempo dipendente, mostra un comportamento irregolare e completamente caotico.
La fluidodinamica del fenomeno fa sì che vi sia una forte generazione di vortici e strutture vorticose, di diverse dimensioni e geometrie; tali vortici sono la causa principale di una forte miscelazione tra le specie presenti.
Riuscire a dimensionare tali strutture significa riuscire in qualche modo a caratterizzare la turbolenza e più in generale la fluidodinamica del problema, potendo così in qualche modo caratterizzare l'energia associata al problema e le sue eventuali dissipazioni.
Le dimensioni caratteristiche di tali vortici e i valori delle variabili caratterizzanti il problema, ricoprono una vasta scala di valori; la difficoltà principale nella risoluzione di un problema i natura turbolenta consiste proprio nel riuscire a quantificare la scala di tali valori e nella determinazioni delle variabili che governano il problema.
Emerge dunque la necessità di determinare alcuni strumenti utili per la risoluzione di un problema turbolento; in passato, i fenomeni turbolenti venivano affrontati e in qualche modo studiati solo attraverso le metodologie sperimentali; oggi, grazie anche alla CFD è possibile simulare e risolvere numericamente problemi di carattere turbolento e con geometrie complesse con un altissimo livello di dettaglio e accuratezza, a scapito chiaramente di un elevato costo economico e computazionale.
Gli approcci e le tecniche di risoluzione più diffusi e utilizzati oggi sono, in ordine di accuratezza, rappresentati da

- *Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS),* ovvero dalle equazioni di Navier Stokes mediate o dalle equazioni di Reynolds; la premessa e l'ipotesi alla base di tale approccio è che variabili come la velocità di un regime turbolento possano essere scritte come la somma di due contributi, un termine medio nel tempo ed una sua fluttuazione. Dalla mediazione delle variabili si ottiene un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali semplificate, perciò con tempi di calcolo decisamente inferiori ma che allo stesso tempo necessitano di alcune equazioni per la chiusura matematica del problema.
- *Large Eddy Simulation (LES),* una tecnica applicativa che prevede direttamente l'analisi delle strutture vorticose; le strutture più grandi di una

dimensione caratteristica, quale semplicemente l'ampiezza di un filtro di natura matematica, vengono risolte numericamente, mentre quelle inferiori vengono modellate . La potenza di calcolo richiesta è superiore rispetto alla tecnica RANS, il livello di accuratezza dei risultati ottenuti è assolutamente accettabile e soddisfacente.

- *Direct Numerical Solution (DNS),* l'approccio con il più alto livello di dettaglio e accuratezza dei risultati raggiunti; esso consiste nella risoluzione numerica delle equazioni di bilancio senza l'introduzione di alcuna semplificazione.
  Si può facilmente dedurre come questo implichi da un lato un altissimo livello di accuratezza dei risultati, mentre dall'altro un costo i termini di risorse computazionali ed economiche elevato. Il suo impego è talmente oneroso che la sua applicazione oggi è prevista, nella maggior parte dei casi, solamente in ambito accademico e nella ricerca.

2.4.1 Approccio RANS

In questa trattazione l'interesse verte maggiormente su un approccio di tipo RANS; come già detto precedentemente tale approccio prevede la scrittura delle variabili fisiche caratterizzanti il problema come la somma di due contributi, un termine medio e un termine legato alle fluttuazioni.

$$v = \bar{v} + v' \tag{44}$$

La velocità viene dunque riscritta come la somma di due contributi, il termine $\bar{v}$ rappresenta i termine medio, mentre il termine v' costituisce il contributo delle fluttuazioni.
La generica grandezza mediata $\bar{f}$ viene definita come:

$$\bar{f}(\bar{x},t)=\frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}\bar{f}(\bar{x},t+\tau)d\tau \tag{45}$$

in cui il termine T rappresenta la scala temporale sufficiente grande rispetto alla scala dei valori turbolenti, e sufficientemente piccola rispetto alla scala di valori dei fenomeni non stazionari.
Tramite l'operazione di mediazione dei dell'equazione (31) assume la forma:

$$\frac{d\rho\bar{\varphi}}{dt}+\bar{v}\nabla(\rho\bar{\varphi})=\nabla\left(\Gamma_{\varphi}\nabla\bar{\varphi}-\rho\overline{v'\varphi'}\right)+\overline{S_{\varphi}} \tag{46}$$

Il termine aggiuntivo $\nabla(-\rho\overline{v'\varphi'})$ rappresenta il tensore degli sforzi di Reynolds $\underline{\tau^{(t)}}$, derivante dalla mediazione del termine convettivo.
Le equazioni di Navier Stokes assumono la forma:

$$\frac{d\rho}{dt}+\nabla(\rho\bar{v})=0 \tag{47}$$

$$\frac{d(\rho\bar{v})}{dt}+\nabla(\rho\bar{v}\,\bar{v})=-\nabla\underline{\bar{p}}+\nabla\underline{\bar{\tau}}+\rho g \tag{48}$$

A questo punto, il set equazione appena scritto necessita di un modello di chiusura per la determinazione del tensore degli sforzi viscosi di Reynolds.

2.4.2 Modello k-ε

Il modello k-ε prevede la determinazione del tensore degli sforzi viscosi basandosi sulla definizione di Bussinesq. Si tratta di un modello semiempirico proposto nel 1972 da Launder.
Tale definizione prevede la definizione del termine $-\rho\overline{v'_{\iota}v'_{J}}$ come:

$$-\rho\overline{v'_\iota v'_\jmath} = \mu_t\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\mu_t\frac{\partial v_k}{\partial x_k}\delta_{ij}-\frac{2}{3}\rho k\delta_{ij} \tag{49}$$

Secondo l'approccio di Boussinesq, si assume che le differenze di densità possano essere trascurabili in tutti i vari termini, ad eccezione di quelli in cui compaia il prodotto tra la densità e l'accelerazione di gravità. Questo è possibile poiché il contributo di questi termini è tale da non poter essere trascurabile.
Il termine μ_t introdotto nell'equazione (49) rappresenta la viscosità turbolenta, la cui derivazione viene affrontata tramite l'introduzione di ulteriori equazioni.
Nella stesura del modello k-ε vengono introdotte altre due equazioni di bilancio, una riferita all'energia cinetica turbolenta k e l'altra alla velocità di dissipazione ε.
La derivazione della prima equazione viene ricavata in modo rigoroso dal modello teorico di formazione dei vortici turbolenti, mentre la seconda viene derivata per analogia con la prima.
La formulazione delle due equazioni è data da:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho k v_i)}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right]+G_k+G_b-\rho\varepsilon+S_k \tag{50}$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho\varepsilon v_i)}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right]+C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}(G_k+C_{3\varepsilon}G_b)-C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k}+S_\varepsilon \tag{51}$$

I termini che compaiono nelle equazioni (50) e (51) sono:

$$G_k=-\rho\overline{v'_\iota v'_\jmath}\frac{\partial v_j}{\partial v_i} \tag{52}$$

che rappresenta la generazione di energia cinetica turbolenta k dovuta ai gradienti di velocità, e

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial T}{\partial x_i} \tag{53}$$

che rappresenta la generazione di energia cinetica turbolenta dovuta alle spinte di galleggiamento; il termine β costituisce il coefficiente di espansione termica, mentre g_i è la componente i-esima dell'accelerazione di gravità.
I termini S_k e S_ε sono termini sorgente definibili dall'utente a seconda del caso studio.
Tramite la teoria di Kolmogorov, la viscosità turbolenta è esprimibile tramite la relazione:

$$\mu_t = \frac{\rho c_\mu k^2}{\varepsilon} \tag{54}$$

I valori delle diverse costanti che compaiono in tale analisi vengono riportati nella tabelle seguente

Tabella 3 Valori delle costanti riferite al modello k-ε

c_μ	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	$C_{3\varepsilon}$	σ_k	σ_ε
0.09	1.44	1.92	1	1	1.3

La stabilità e la robustezza del modello appena descritto lo rendono oggi uno dei modelli più utilizzato nelle analisi fluidodinamiche e nella CFD, grazie anche alla sua convalida ormai ampiamente eseguita.

2.4.3 Modello k-ω

Il modello k-ω è un altro modello utilizzato per la chiusura del problema turbolento.
Esso rappresenta un modello empirico basato sulla stesura delle equazioni di trasporto di energia cinetica k e la velocità di dissipazione specifica ω, che può essere pensata come il rapporto tra ε e k.

Il modello k-ω è stato modificato e revisionato negli anni per migliorarne l'accuratezza e l'affidabilità.
Il modello k-ω si basa sulle seguenti equazioni di trasporto:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho k v_i)}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right]+G_k+G_b-\rho\varepsilon+S_k \tag{55}$$

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho\omega v_i)}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\omega}\right)\frac{\partial\omega}{\partial x_j}\right]+\alpha\frac{\omega}{k}G_k-Y_\omega+S_\omega \tag{56}$$

dove l'espressione di G_k è quello riportato nell'equazione (52), il termine α è un parametro definito come:

$$\alpha=\frac{\alpha_\infty}{\alpha^*}\left(\frac{\alpha_0+Re_t/R_\omega}{1+Re_t/R_\omega}\right) \tag{57}$$

in cui:

$$R_\omega=2.95\alpha^* \tag{58}$$

$$Re_t=\frac{\rho k}{\mu\omega} \tag{59}$$

Per valori alti di Reynolds si assume $\alpha=\alpha_\infty=1$.
Il termine Y_ω rappresenta la dissipazione di ω.

2.5 Risoluzione in CFD delle equazioni di bilancio

Le equazioni di bilancio riportate precedentemente associate ai modelli di chiusura descritti conducono ad un sistema di equazioni algebrico-differenziale, nel quale le equazioni differenziali sono equazioni alle derivate parziali la cui risoluzione analitica non risulta possibile.

La CFD, per la risoluzione di queste, si affida alle tecniche previste dal calcolo numerico; nello specifico, l'idea alla base di queste tecniche è quella di discretizzare il dominio di calcolo con opportune metodologie, e di discretizzare le equazioni differenziali in modo tale da risolvere numericamente le equazioni in ogni punto della griglia (nodo). Si può facilmente dedurre la dipendenza dei modelli CFD dalle coordinate spaziali; per questo motivo i modelli CFD vengono anche definiti "modelli a parametri distribuiti", per sottolineare tale dipendenza dalle tre coordinate spaziali, a differenza dei "modelli a parametri concentrati" la cui dipendenza è dettata solo da una coordinata curvilinea.

La fase inziale dunque della risoluzione di un problema tramite la CFD prevede la costruzione della griglia di calcolo. Poi si procede verso la fase di calcolo, la quale prevede la determinazione dei dati, delle sostanze utilizzate, la fase di settaggio delle impostazioni e delle condizioni al contorno, di quelle inziali e di quelle operative del problema analizzato.

Le principali condizioni al contorno utilizzate nella trattazione qui illustrata sono

- *velocity inlet,* usata per definire la superficie da cui si vuol far fuoriuscire un fluido con ingresso nel dominio di calcolo; prevede la determinazione di una velocità del fluido specificato all'interno del dominio; è necessario imporre la direzione della velocità, il modulo della velocità, i valori di k e di ε relativi alla superficie alla quale è applicata.
- *mass flow inlet,* per le superfici dalle quali si ha una fuoriuscita di fluido verso l'interno del dominio; impone da una superficie una determinata portata di una sostanza o di una miscela; bisogna dunque che l'utente definisca il valore della portata, la composizione della miscela e la direzione nella quale fluisce la portata.
- *pressure outlet,* usata per quelle superfici dalle quali si vuole far fuoriuscire un fluido dal dominio di calcolo; è necessario indicare il valore della pressione in uscita, di k e di ε di *backflow*.
- *internal,* per tutte quelle superficie che sono interne al dominio di calcolo e che non hanno alcun impatto sulla fisica e sulla geometria del problema.

- *wall,* per quelle superfici che non possono essere oltrepassate da alcun tipo di fluido e che nella geometria reale sono costituite da superfici solide; risulta necessario imporre il valore di rugosità e di temperatura alla quale si trova.
- *Simmetry*, la quale impone solamente le componenti della velocità perpendicolari alla superficie

La fase successiva prevede la risoluzione vera e propria delle equazioni ed infine si passa all'analisi dei risultati.

2.5.1 Metodi di discretizzazione

"Discretizzazione", in ambito CFD significa sostituire le equazioni differenziali o integrali con equazioni di natura algebrica derivanti dalla discretizzazione del volume di controllo analizzato.

I metodi di discretizzazione sono tre,

- *Alle differenze finite,* proimo metodo di discretizzazione adottato dalle fluidodinamica e il più semplice dei tre. Consiste nel sostituire le derivate con il loro rapporto incrementale; si capisce come in questo modo i termini differenziali diventino dei termini algebrici.
- *Agli elementi finiti (FEM),* principalmente utilizzato nell'analisi strutturale e nella fluidodinamica per numeri di Reynolds superiori alle decine di migliaia. Si suddivide il continuum in un numero elevato di elementi finiti, di cui poi ognuno rappresenta un campo di integrazione numerica, in cui la soluzione si approssima con una combinazione lineare di funzioni.
- *Ai volumi finiti,* la tipologia più utilizzata delle tre in ambito CFD e quella adottata in tale trattazione.

  Tale metodologia è basata sull'integrazione delle equazioni differenziali alle derivate parziali che compongono il problema analizzato in un volume, denominato volume di controllo, sul quale sulle superfici esterne sono imposte a priori delle condizioni al contorno.

Il volume interno viene suddiviso in volumetti elementari, posti in collegamento l'uno all'altro tramite quelle relazioni dettate dalle equazioni integrali che caratterizzano il problema.
Si può dedurre però come il conferimento a tali volumetti, dimensioni finite e non infinitesime, comporti e introduca nella trattazione un'approssimazione e di conseguenza un certo errore.
Partendo dall'equazione generale in forma integrale:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho\varphi dV + \oint_S \bar{F}\, dS = \int_V Q_V dV + \oint_S \overline{Q_S} dS \tag{60}$$

e sostituendo il vettore dei flussi $\bar{F}$ con il termine $\rho v\varphi - \Gamma_\varphi \nabla\varphi$ si ottiene la forma integrale dell'equazione generale di conservazione per ogni volume:

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho\varphi dV + \oint_S (\rho v\varphi - \Gamma_\varphi \nabla\varphi)\, dS = \int_V Q_V dV + \oint_S \overline{Q_S} dS \tag{61}$$

A questo punto è possibile discretizzare l'equazione come:

$$\frac{\Delta V}{\Delta t}[(\rho\varphi)^{t+\Delta t} - (\rho\varphi)^t] + \sum \rho v\varphi S - \sum \Gamma_\varphi \nabla\varphi S = Q_V \Delta V + \sum Q_S S \tag{62}$$

in cui le sommatorie vengono riferite alle facce dei volumi.
E' richiesta, a partire dalla soluzione ottenuta, un'interpolazione tra i dati del centro cella poiché questa viene appunto riferita al centro del volumetto.

2.6 Griglia di calcolo (mesh)

La geometria del problema e successivamente la griglia di calcolo vengono generate attraverso l'utilizzo di opportuni software. Nella trattazione qui presentata sono stati utilizzati il software Gambit 2.4.6 e il software Workbench 15.

Il dominio di calcolo e la geometria vanno costruiti seguendo tutte quelle regole di buona norma, ovvero in dimensioni tali da poter contenere tutti gli elementi e gli oggetti che fanno parte dell'analisi in esame. Successivamente, nella costruzione della griglia andranno considerati tutti gli aspetti del problema dal punto di vista dell'accuratezza; ciò vale a dire che nella geometria del problema analizzato sarà necessario valutare tutte quelle zone che necessitano di un livello di dettaglio e di accuratezza maggiore.

Per quanto riguarda le diverse tipologie delle griglie di calcolo, ne esistono fondamentalmente tre tipologie strutturate, non strutturate e ibride.

Le prime sono la tipologia più regolare, costituite da elementi di forma rettangolare o quadrangolare in due dimensioni, oppure da prismi o esaedri per quelle tridimensionali. Le linee che si intersecano l'una con l'altra possono essere identificate con un nome; di conseguenza i punti di intersezione tra le diverse linee possono essere individuati tramite i numeri con i quali le linee sono state classificate.

In questo modo, grazie all'organizzazione e alla struttura rigorosa di tale tipologia di mesh, è possibile risolvere in ogni punto le equazioni di bilancio in forma algebrica in modo preciso e accurato, grazie anche all'ausilio di metodi di calcolo e codici ideati per la mesh stessa.

Il limite più ampio delle mesh di calcolo strutturate consiste per nella loro applicazione solamente per quelle tipologie di geometrie non troppo complesse; inoltre la distribuzione delle celle non è garantito che sia uniforme, portando così a zone in cui la griglia risulta più fitta pur non essendo richiesto un alto livello di dettaglio per quella zona.

La seconda tipologia di griglia di calcolo, quella non strutturata, prevede l'adozione di elementi di forma triangolare per griglie in due dimensioni, e di forma tetraedrica o

piramidale in tre dimensioni; in generale sono comunque ammesse per questa tipologia elementi di qualunque forma.
La potenza maggiore di queste mesh risiede nella possibilità di poterle applicare in geometrie molto complesse, potendo così creare una mesh con una distribuzione di celle ad hoc per il problema e la geometria analizzata. Il livello di dettaglio risulta comunque potenzialmente elevato, grazie alla possibilità di poter infittire la griglia specialmente nelle zone di maggiore interesse.
Essa è applicabile per ogni tipologia di discretizzazione, ma viene impiegata maggiormente con la tecnica dei volumi finiti.
Soluzioni calcolate con mesh non strutturate risultano tuttavia più lente rispetto ai casi di mesh strutturate, proprio per un maggior disordine delle matrici dei risultati.
Le griglie ibride sono costituite da una combinazione delle altre due tipologie. Per questo motivo sono applicabili a molti casi. Per questa loro possibilità di adattamento risultano più complesse e di conseguenza necessitano di un tempo di calcolo maggiore.
In caso di modellazione di dispersioni, nella maggior parte dei casi, vengono utilizzate le griglie ibride, con elementi solitamente non strutturati di forma tetraedrica o piramidale e strutturati di forma prismatica o esaedrica; questo varia a seconda delle zone della mesh di calcolo, per caratterizzare le diverse zone della geometria a seconda delle caratteristiche del problema.
Le dimensioni delle varie celle di calcolo possono variare in modo molto ampio da una regione all'altra; ciò avviene perché, sempre in accordo con le peculiarità del mio problema, in alcune zone potrei aver bisogno di un livello di dettaglio maggiore rispetto ad altre, e quindi una griglia di calcolo più fitta rispetto ad altre zone.
La qualità della griglia di calcolo dipende da alcuni parametri quali

- *skewness,* ovvero un parametro che valuta la simmetria degli elementi generati tramite due differenti grandezze, l'*equiangle skew,* definito a partire dall'angolo minimo ϑ_{min} e quello massimo ϑ_{max} della cella di calcolo come:

$$Q_{EAS} = max\left[\frac{\vartheta_{max} - \vartheta_{eq}}{180 - \vartheta_{eq}}, \frac{\vartheta_{eq} - \vartheta_{min}}{\vartheta_{eq}}\right] \quad (63)$$

in cui il termine ϑ_{eq} rappresenta l'angolo caratteristico corrispondente ad una cella equilatera avente una forma simile, del valore di 60° per elementi triangolari e tetraedrici, 90° per elementi quadrilateri ed esaedrici.
L'indice espresso deve avere un valore compreso tra 0 e 1.
L'altra grandezza è data dall' *equisize skew*, ovvero un parametro definito a partire dalla superficie o dal volume, a seconda che il caso sia bidimensionale o tridimensionale, dell'elemento considerato.
E' definito come:

$$Q_{EVS} = \frac{S_{eq} - S}{S_{eq}} \quad (64)$$

dove S_{eq} rappresenta il volume o l'area massima di una cella con tutti i lati uguali e identico raggio circoscritto.
Come il valore precedente, il valore deve essere compreso tra 0 e 1.
La seguente tabella rappresenta una qualità della mesh rapportata a diversi valori di skewness,

Tabella 4 valori di Skewness per diverse qualità della griglia

Skewness	**Qualità**
0 – 0.25	Eccellente
0.25 – 0.5	Buona
0.5 – 0.8	Accettabile
0.8 – 0.95	Povera
0.95 – 0.99	Molto scarsa
0.99 – 1.00	Degenere

- *Smoothness,* parametro che valuta la gradualità con cui aumenta la dimensione di una cella rispetto all'altra. Il suo valore deve essere il più alto possibile.
- *Aspect Ratio,* rapporto tra le dimensioni dello spigolo maggiore e quella dello spigolo minore; il suo valore ideale sarebbe pari a 1.

2.7 Influenza delle condizioni atmosferiche

Per quanto concerne le condizioni ambientali, i modelli integrali, come anche la CFD permettono di tener conto di alcuni parametri ambientali. Si può immaginare come le condizioni climatiche possano influire su una dispersione di un inquinante in atmosfera; infatti la turbolenza del fenomeno è fortemente condizionata dalle condizioni atmosferiche, in particolare da un parametro di fondamentale importanza, la velocità del vento; altri parametri sicuramente incidenti sullo sviluppo del fenomeno sono la temperatura, l'umidità dell'aria circostante, e la pressione.
La stabilità atmosferica è caratterizzata da tutti i parametri sopra indicati; in base a questa, la dispersione di un inquinate può essere più o meno favorita.
Il concetto di stabilità atmosferica viene definito in rapporto a possibili moti di ricircolazione in riferimento al profilo di temperatura potenziale, quello che è possibile ottenere dalla trasformazione adiabatica di un volume sufficientemente piccolo di aria, in relazione a variazioni di valori di pressione atmosferica al variare della quota.
Il volumetto di aria che risulta soggetto ad un moto verticale verso l'alto a causa di vortici turbolenti, si ritrova ad una pressione diversa che quindi porta a variazioni del valore di temperatura dopo un certo intervallo di tempo.
E' possibile dedurre come la variazione di pressione avvenga senza alcuno scambio energetico, perciò la temperatura finale alla quale si porta il volumetto d'aria è pari a quella di una trasformazione adiabatica dalla pressione iniziale a quella finale.

In base alle variazioni di temperatura, possono crearsi tre differenti casi ben distinti l'uno dall'altro, a seconda che la temperatura raggiunta dal volumetto d'aria sia minore, uguale o maggiore a quella dell'aria circostante, come mostrato in figura

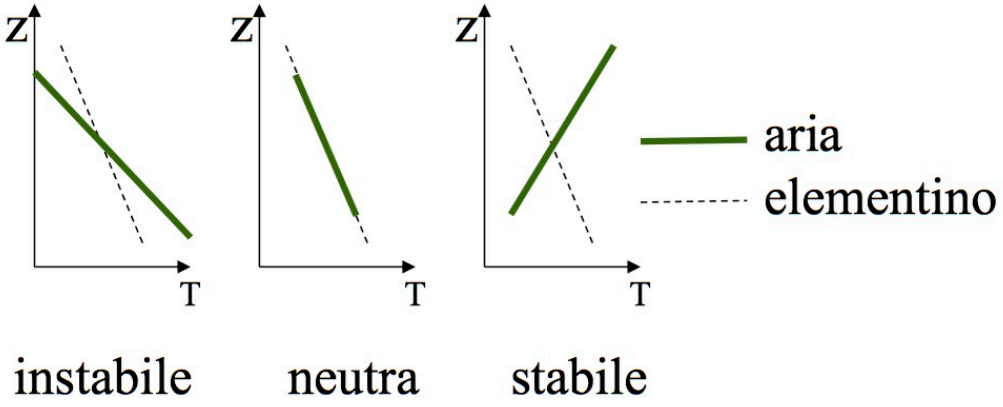

Figura 11 Diversi casi della stabilità atmosferica

In base ai valori di temperatura raggiunta, il volumetto può variare la quota, portandosi più in alto oppure riportarsi alla quota di partenza; nel primo caso l'atmosfera viene definita come *instabile*, nel secondo caso come *stabile*.

Nel caso in cui invece non vi siano variazioni della quota del volumetto, l'atmosfera viene definita come *neutra*.

Per valutare il grado di stabilità dell'atmosfera, Pasquill ha ideato una classificazione, come mostrato di seguito,

Tabella 5 Classi di stabilità

Classe di stabilità	**Definizione**
A	Molto instabile
B	Instabile
C	Leggermente instabile
D	Neutra
E	Leggermente stabile
F	Stabile

Si può tuttavia dedurre come, per valutare la stabilità dell'atmosfera siano molti i parametri da considerare e come allo stesso tempo sia difficoltoso misurarli. Il metodo di Pasquill rappresenta comunque una soluzione molto utilizzata.
Le varie classi riportate nella tabella 6 sono determinate in base a valori di parametri facilmente determinabili. Diversi sono i criteri per correlare le sei classi di stabilità ai parametri considerati, uno di questi è il metodo di Turner, riassunto nella tabella 6.

Tabella 6 Stima delle classi di stabilità in base a parametri macroscopici dell'atmosfera

Velocità del vento	Intensità della radiazione solare [W/m²]			Copertura nuvolosa notturna	
m/s	Forte (>700)	Moderata (350-700)	Leggera (<350)	>50%	<50%
<2	A	A-B	B	E	F
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D
Nota: La classe di stabilità D si applica a cieli molto coperti, a qualsiasi velocità del vento, giorno e notte					

Si evince dalla tabella 6 come sia a questo punto importante stimare la velocità del vento. A causa del terreno e degli ostacoli presenti sul terreno, la velocità del vento seguirà un andamento tipico dello strato limite del moto di un fluido; essa perciò aumenta all'aumentare della quota, secondo un'espressione analitica del tipo:

$$u(z) = \frac{u_*}{K} \ln \left(\frac{z}{z_0} + 4.5 \frac{z}{L}\right) \tag{65}$$

in cui K rappresenta la costante di Von Karman del valore di 0.41, z_0 rappresenta la quota di riferimento a cui la velocità si annulla, u_* è la velocità di attrito definita a partire dallo sforzo di taglio al suolo τ_0 con la seguente espressione:

$$u_* = \sqrt{\frac{\overline{\tau}}{\rho}} \tag{66}$$

L invece rappresenta la lunghezza di Monin-Obukhov, parametro fondamentale delle condizioni di stabilità.

CAPITOLO 3

RISULTATI

La trattazione qui proposta ha come obiettivo principale quello di proporre un metodo per la simulazione fluidodinamica di un getto ad alta pressione in CFD, partendo dai dati ottenuti attraverso una prima analisi tramite il software PHAST, rappresentante dei modelli integrali precedentemente descritti.
Il lavoro illustrato vuole dunque evidenziare alcuni accorgimenti necessari e possibili problematiche nelle quali è possibile incorrere durante la simulazione in CFD di un caso studio simile a quello qui riportato.

3.1 Definizione del caso studio

Il rilascio descritto nel lavoro qui illustrato è costituito da una dispersione accidentale di GN stoccato all'interno di un ORV (Open Rack Vaporizer), ovvero un'unità di rigassificazione del gas che precedentemente viene liquefatto per rendere meno difficoltosa l'operazione di trasporto.
Il funzionamento di un ORV è basato principalmente sull'utilizzo di acqua marina per innalzare la temperatura del gas, portandolo così da una temperatura di circa -160°C in fase liquida ad una temperatura di circa 5°C allo stato gassoso.
Lo scenario incidentale ipotizzato è una perdita dal tubo uscente dall'ORV, avente diametro pari a 80 cm, sul quale si ipotizza una cricca del diametro equivalente di un pollice.
Il rilascio viene considerato stazionario perché la dimensione del foro di uscita è trascurabile rispetto al diametro del tubo ed è quindi possibile ipotizzare che le

condizioni operative delle apparecchiature a monte non siano influenzate dal rilascio del gas; la velocità di efflusso viene considerata avente solo componente parallela al terreno.

3.1.1 Condizioni operative

Il problema è stato analizzato considerando come condizioni interne al tubo una pressione pari a 65.13 bar e una temperatura pari a 4.5°C. Tali valori sono i valori di partenza per l'analisi tramite il software PHAST.
La miscela di GNL è costituita da diverse sostanze, i cui valori di concentrazioni molari sono riportati nella tabella 7.

Tabella 7 Composizione del GNL

Componente	**% mol**
Metano	92.10
Etano	6.23
Propano	0.71
i-Butano	0.05
n-Butano	0.06
Azoto	0.85
n-Pentano	0.00

Nella trattazione riportata tuttavia, si è deciso di considerare solamente il metano.
La rugosità del terreno è stata considerata pari a un centimetro.

3.2 Calcolo della distanza di danno

Per poter semplificare il più possibile la trattazione qui proposta, si è deciso di partire da una prima analisi tramite i modelli integrali, presentata nel seguente paragrafo. In questo modo è stato possibile ricavare il valore del diametro equivalente utilizzato nei modelli analitici ed inoltre è stato possibile semplificare la simulazione in CFD potendo così considerare il gas come ideale e incomprimibile, come verrà mostrato in seguito. Inoltre, partendo dal diametro equivalente calcolato da PHAST, i risultati analitici e quelli ricavati in CFD sono riferiti alla stessa sezione di rilascio, rendendo cosi il loro confronto più attendibile.
Per la trattazione analitica è stato possibile ricavare il profilo di concentrazione del getto tramite l'equazione (22), già indicata nel capitolo 2 e riportata nuovamente di seguito per comodità del lettore:

$$j_m = \frac{\frac{b_1 + b_2}{b_1}}{0.32 \frac{x}{d_{eq}} \frac{\rho'_{g,a}}{\sqrt{\rho'_{0,eq}}} + 1 - \rho'_{g,a}} \tag{22}$$

Le condizioni in ingresso sono riportate in tabella 8.

Tabella 8 Dati utilizzati per la trattazione analitica

Grandezza	Valore
Temperatura atmosferica	300 K
Pressione atmosferica	101325 Pa
Peso molecolare dell'aria	0.029 kg/mol
Peso molecolare del	0.016 kg/mol

metano	
Temperatura del metano	-65°C
Pressione del metano	101325 Pa
Diametro equivalente	0.14 m

Osservando i dati, in particolare i valori di temperatura e pressione del metano si nota come questi siano quelli restituiti da PHAST dopo l'espansione atmosferica.
Imponendo nell'equazione (22) il valore di concentrazione cercato, ad esempio il valori pari al limite inferiore di infiammabilità del metano, 0.044, è possibile estrarre la distanza x alla quale tale concentrazione è presente.
Nel caso del metano, si ottiene una distanza di danno pari a circa 26 m.
In figura 12 viene riportato il decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto nel caso analitico.

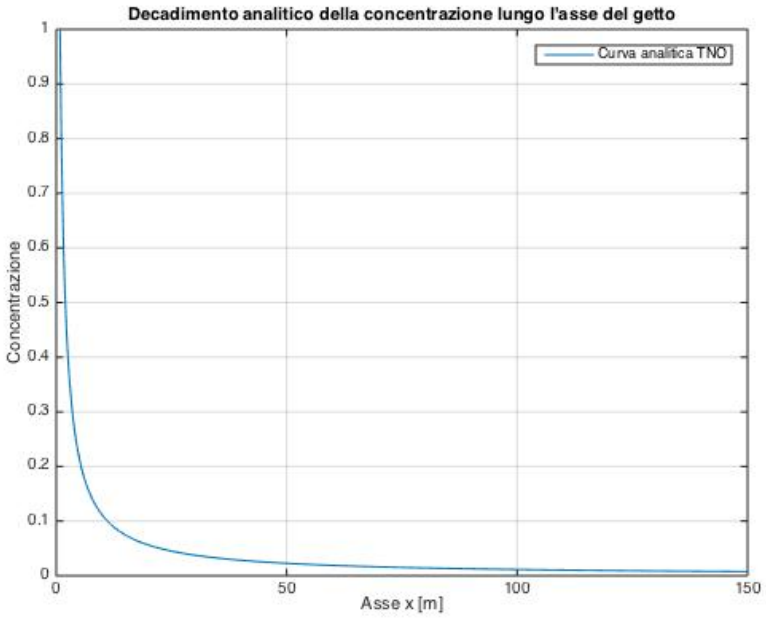

Figura 12 Decadimento analitico della concentrazione lungo l'asse del getto.

3.3 Analisi tramite i modelli integrali

Come già affermato precedentemente, per la trattazione del caso studio qui riportato è stata effettuata una prima analisi tramite il software PHAST, in rappresentanza dei modelli integrali.
Il software è stato utilizzato principalmente per determinare le condizioni operative da cui si è poi partiti per la modellazione tramite la CFD, questo per ridurre il costo computazionale richiesto dai modelli tridimensionali applicando un modello di gas ideale e incomprimibile.

3.3.1 Parametri in ingresso

Al fine di ottenere i parametri operativi di nostro interesse e il diametro equivalente del foro di rilascio, tenendo quindi conto del diametro equivalente, è stata realizzata una prima analisi in PHAST.
In input al software PHAST sono stati inseriti le condizioni di stoccaggio del gas, l'altezza e le dimensioni del foro di rilascio, le condizioni ambientali, quali ad esempio la velocità del vento e il valore della rugosità del terreno.
Il programma contiene già di default una raccolta dei valori di tossicità e infiammabilità delle varie sostanze; nel nostro caso, considerato il gas metano, tali valori sono stati mantenuti invariati rispetto a quelli di PHAST.
I valori e i parametri di input della trattazione integrale sono riportati nella tabella 9:

Tabella 9 Valori di input forniti al software PHAST

Materiale	
Nome	Metano
Stoccaggio	Gas sotto pressione
Pressione	64.12 bar
Temperatura	4.5°C
Massa	10^9 kg
Scenario	

Tipologia	Perdita
Fase di rilascio	Vapore
Diametro del foro	25.4 mm (1 inch)
Posizione	
Altezza	1 m
	25 m
Interno/esterno	
Posizione del rilascio	Rilascio in campo aperto
Direzione del rilascio	Orizzontale
Condizioni climatiche	
Velocità del vento	5 m/s
Classe di stabilità di Pasquill	D
Rugosità della superficie	1 mm
Temperatura atmosferica	28°C
Temperatura della superficie	28°C
Umidità relativa	0.62

Si vuole focalizzare l'attenzione del lettore sull'altezza del rilascio. Sono state eseguite infatti due simulazioni, una con il foro a 1 m da terra, l'altra con il foro a 25 m, questo per poter confrontare, come si vedrà in seguito, le diverse casistiche analizzate in Fluent con i modelli integrali.

Come già affermato in precedenza, per semplicità il materiale è stato approssimato a metano puro, data la composizione del GNL composta per il 92% da metano e data in questo modo la possibilità di considerare il metano come un fluido puro, semplificando così la trattazione.

Il valore della massa considerata, 10^9 kg, è stato stimato in modo da poter considerare il rilascio come stazionario.

I valori di temperatura atmosferica e umidità relativa sono stati scelti in base a valori standard dell'atmosfera.

Per la risoluzione inoltre, essendo il rilascio in campo aperto, è stato esaminato il caso di Open Field.

3.3.2 Parametri in uscita

In tabella 10 vengono riportati i dati del getto dopo l'espansione atmosferica restituiti dalla simulazione effettuata con il software PHAST.

Tabella 10 Valori di output restituiti dal software PHAST

Grandezza	**Valore**
Generale	
Portata massiva	5.55 Kg/s
Durata del rilascio	3600 s
Dati di uscita dell'orifizio o del tubo (prima dell'espansione atmosferica)	
Pressione	34.80135 bar
Temperatura	-38.54095 °C
Velocità in vena contratta	377.86829 m/s
Coefficiente di efflusso	0.86828
Dati finali (dopo l'espansione atmosferica)	
Temperatura	-65.72466°C
Raggio espanso	0.07037 m
Velocità	376.62030 m/s

Dai risultati ottenuti possiamo notare come il valore di 10^9 kg della massa di metano impostata in input sia sufficiente a garantire un tempo del rilascio tale da poter considerare quest'ultimo stazionario.
Dalla tabella 10 notiamo che vi sono alcuni dati riferiti a prima dell'espansione atmosferica e alcuni riferiti a dopo l' espansione atmosferica. Questo perché la zona

relativa a ciò che è antecedente l'espansione atmosferica è quella che era stata definita *potential core regione*, ossia quella regione alla fine della quale la pressione del getto è pari a quella dell'aria circostante.
Si nota infatti come tra i risultati post-espansione atmosferica non compaia il valore della pressione, proprio perché arrivati a questo punto il getto si trova a pressione atmosferica.
I dati relativi al post-espansione atmosferica sono quelli che poi vengono inseriti nella trattazione CFD e il vero e proprio punto di partenza del lavoro qui illustrato.
Per la determinazione della modellazione di un getto ad alta pressione di considera pertanto, come sezione di rilascio, una sezione circolare avente come raggio il raggio espanso indicato nella tabella 9.
Per confrontare i risultati di PHAST con quelli che verranno ottenuti con il software CFD Fluent, ci si riferisce alla distanza alla quale corrisponde una concentrazione pari al limite inferiore di infiammabilità.
Un parametro sicuramente rilevante ai fini della prevenzione e della sicurezza nell'industria di processo è dato dal limite inferiore di infiammabilità (LFL).
Il limite inferiore di infiammabilità di una sostanza rappresenta il valore minimo di concentrazione di quella sostanza in aria capace di creare una miscela infiammabile.
Parallelamente il limite superiore di infiammabilità (UFL) di una sostanza è definito come il valore massimo di concentrazione tale da garantire che la miscela combustibile e comburente sia una miscela infiammabile.
Ogni sostanza ha valori differenti dei limiti di infiammabilità; nella seguente tabella vengono riportati i valori corrispondenti ai limiti di infiammabilità riferiti al metano.

Tabella 11 Valori relativi al campo di infiammabilità per una miscela aria-metano

	Concentrazione molare
UFL	0.165
LFL	0.044

Per il caso in esame, che prevede la dispersione di gas metano, la distanza raggiunta dalla concentrazione pari al LFL, considerando il foro ad un metro di altezza e la rugosità del terreno pari a un centimetro, è circa 25 m.
In figura 13 viene riportato l'andamento della concentrazione lungo l'asse del getto al variare della distanza dal punto di rilascio per il modello analitico e il software PHAST valutato a 25 m di altezza, per rendere il caso confrontabile con il getto libero. Si può facilmente notare come i due risultati siano molto vicini.

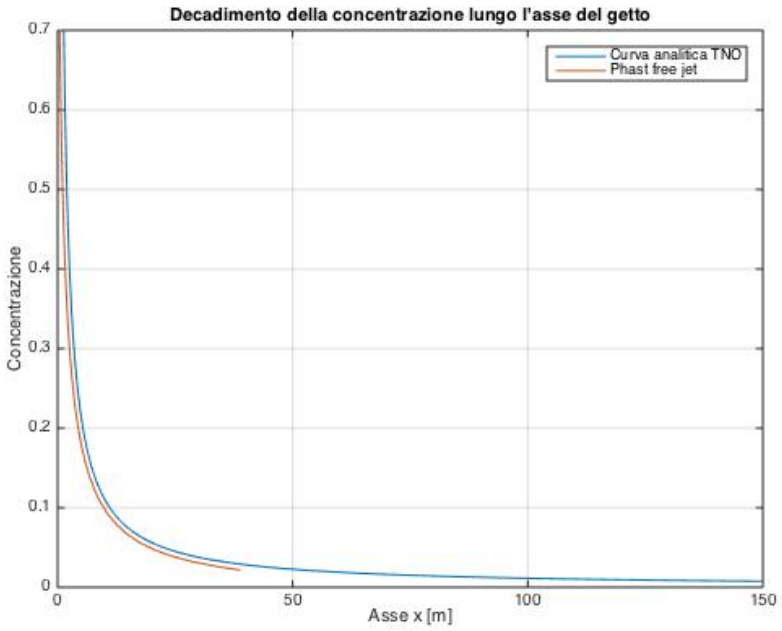

Figura 13 Confronto del decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto tra il modello analitico e il software PHAST per getto libero

Nella figura 14 viene riportato invece il confronto tra le due simulazioni in PHAST, una con il foro ad un metro da terra, l'altra con il foro a 25 m, per simulare il caso di un getto libero.
Dal confronto tra le due, si nota come l'influenza del terreno sia comunque individuata dai modelli integrali; come si vedrà in seguito però, il terreno mostra una maggiore influenza nei modelli CFD.

Nella figura 14 inoltre, viene riportato il valore di LFL, per mostrare comunque come le distanze di danno siano vicine. Lo scostamento nella curvatura dei grafici è dovuto in parte alla presenza del terreno, in parte a valori differenti di velocità a causa del profilo di velocità; essendo l'andamento della velocità direttamente proporzionale alla quota, all'aumentare dell'altezza la velocità aumenta. Aumentando la velocità, aumenta anche la miscelazione dell'aria, portando così a un accorciamento della lunghezza del getto.

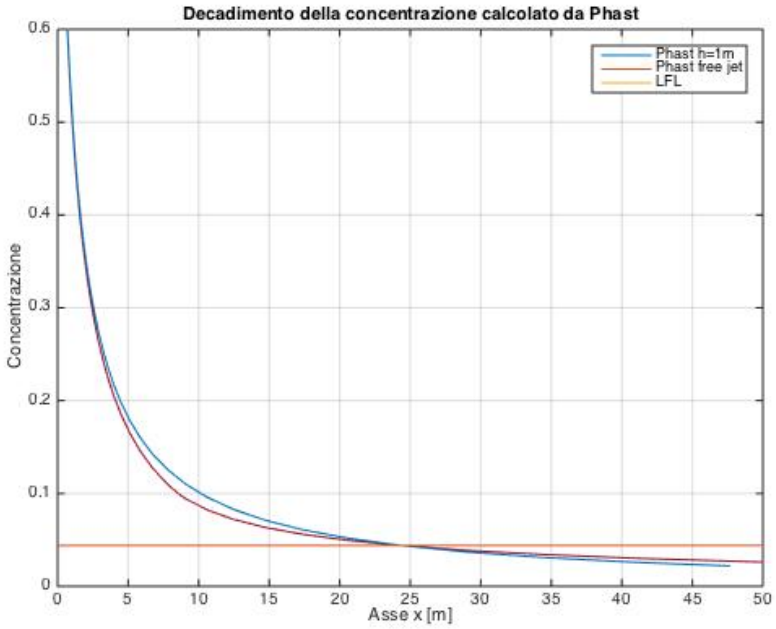

Figura 14 Confronto tra i due andamenti ricavati da PHAST 6

3.4 Modellazione con Ansys Fluent

A partire dai dati raccolti tramite l'analisi eseguita con i modelli integrali, è stata effettuata la modellazione con il software Ansys Fluent.

Il lavoro qui illustrato propone un metodo per modellare un getto, a partire dalla zona a valle dell'espansione atmosferica; vuole dunque concentrarsi sulla dispersione vera e propria dell'inquinante, tralasciando la parte di espansione atmosferica all'inizio del fenomeno.

Il motivo per il quale la scelta è ricaduta sulla modellazione solo della parte a valle dell'espansione atmosferica è stato che così facendo risulta possibile modellare il problema assumendo l'ipotesi di incomprimibilità e gas perfetto, risparmiando dunque sul costo computazionale e sul tempo di calcolo necessario per la risoluzione in CFD.
Di seguito viene riportata un'analisi per la verifica di alcune proprietà del fluido, seguita poi dalla risoluzione del problema, a partire dalla costruzione della geometria, della griglia di calcolo e proseguendo infine con la modellazione attraverso diverse fasi necessarie per verificare la validità del metodo.
Verranno inoltre sottolineate alcune accortezze necessarie alla modellazione di un getto ad alta pressione come quello considerato.

3.4.1 Verifica delle caratteristiche del fluido

Nella modellazione del caso studio qui proposto si è deciso di considerare il gas metano come un gas ideale, neutro e incomprimibile; al fine di convalidare la correttezza di tale ipotesi, sono state fatte alcune verifiche sul fluido.

3.4.1.1 Gas ideale

L'ipotesi di idealità del gas è stata verificata per la valutazione del comportamento del gas metano alle basse temperature considerate nella trattazione qui illustrata; lo scopo principale è stato verificare quindi se alle basse temperature considerate il metano si comporta in modo tale da considerare ancora valide le leggi dei gas perfetti.
Il metodo per valutare tale proprietà è considerare la compressibilità Z del fluido, che per i gas perfetti risulta pari a 1. La valutazione di Z è stata realizzata seguendo l'equazione degli stati corrispondenti, riportata qui di seguito,

$$Z = Z_0(T_R, P_R) + \omega Z_1(T_R, P_R) \tag{67}$$

in cui Z_0 e Z_1 rappresentano due parametri tabulati che dipendono da T_R e P_R, rispettivamente dalla temperatura e dalla pressione ridotta, calcolate in funzione della temperatura critica e della pressione critica, T_c e P_c.
La temperatura critica e la pressione critica sono definite come

$$T_R = \frac{T}{T_c} \tag{68}$$

$$P_R = \frac{P}{P_c} \tag{69}$$

ω rappresenta il fattore acentrico di Pitzer, il quale viene definito come

$$\omega = -\log_{10} P_R^0(T_R = 0.7) - 1 \tag{70}$$

dove $P_R^0(T_R = 0.7)$ è la tensione di vapore ridotta, calcolata ad una temperatura ridotta pari a 0.7 (Rota [19])

Nella seguente tabella vengono riassunti i dati riferiti al metano per l'equazione degli stati corrispondenti.

Tabella 12 Parametri per la risoluzione dell'equazione degli stati corrispondenti

Variabile	**Valore**
Temperatura	207.4253388 K
Pressione	101325 Pa
Temperatura critica	190.6 K
Pressione critica	4.6e6 Pa
Temperatura ridotta	1.0883
Pressione ridotta	0.0220
Fattore acentrico di Pitzer	0.011

Z_0	0.9936
Z_1	-0.00066082
Z	0.9936

I parametri Z_0 e Z_1 sono stati ricavati tramite un'interpolazione doppia dei dati ricavati dalle tabelle di Lee-Kesler, compilate appunto per la risoluzione dell'equazione (67).
Dalla tabella 12 si può notare come il valore di Z sia molto vicino a 1, valore che quindi conferma l'ammissibilità dell'ipotesi del metano come gas ideale.

3.4.1.2 Gas denso

La validità dell'ipotesi di gas ideale del gas metano permette di poter effettuare il calcolo della densità del gas tramite l'equazione dei gas perfetti, come riportato qui di seguito,

$$\rho = \frac{P\ PM}{R\ T} \tag{71}$$

I valori di pressione e temperatura sono stati riferiti alle condizioni a valle dell'espansione atmosferica, quindi considerando il gas alla pressione atmosferica (101325 Pa) e alla temperatura restituita in output da PHAST (-65.72°C).
Il valore ottenuto è stato poi confrontato con il valore della densità dell'aria, per valutare se alle basse temperature considerate il comportamento del metano diventi assimilabile ad un gas denso.

Tabella 13 Calcolo delle densità del metano e dell'aria

Parametri generali		**Valore**	
Pressione [atm]		1	
R [m^3 atm/K/mol]		8.02574587e-5	
Metano		**Aria**	
Peso molecolare metano[g/mol]	16	Peso molecolare aria [g/mol]	28.9

Temperatura metano [K]	207.4253	Temperatura aria [K]	301.15
Densità metano [kg/m^3]	0.94002	Densità aria [kg/m^3]	1.13307
Rapporto densità metano/densità aria		0.829627254	

Dai risultati ottenuti si nota come il rapporto tra la densità del metano e quell'aria sia inferiore a 1, potendo così escludere il comportamento di un gas denso da parte del metano.

3.4.1.3 Incomprimibilità

La densità è una proprietà fisica delle sostanze che varia a seconda della temperatura; la verifica qui proposta vuole verificare comunque l'ammissibilità di considerare la densità del metano come costante, introducendo in tal caso chiaramente un errore ma di dimensioni trascurabili.
Tramite la legge dei gas perfetti sono state calcolate le densità del metano alla temperatura di efflusso e alla temperatura ambiente, per verificarne il rapporto.
Nella tabella che segue vengono riportati i dati raccolti.

Tabella 14 Calcolo della densità del metano per diversi valori di temperatura

Parametri generali		**Valore**	
Pressione [atm]		1	
R [m^3 atm/K/mol]		8.205745e-5	
Peso molecolare metano [g/mol]		16	
Metano alla T di efflusso (207,4253388 K)		Metano alla T ambiente (301,15 K)	
Densità metano [kg/m^3]	0.940026532	Densità metano [kg/m^3]	0.647469108
Rapporto densità efflusso/densità ambiente		1,451847695	

Si può notare come in questo caso la densità sia diversa nei due casi, ciò significa che non è possibile considerare il metano a densità costante; si è dunque deciso di

considerare il metano come un gas incomprimibile, ovvero come un gas la cui densità dipende solo dalla temperatura.

3.4.2 Geometria

La realizzazione della geometria è stata implementata tramite due software, GAMBIT 2.4.6 e Workbench 15.

La scelta dei due software è stata effettuata per un semplice confronto tra i due, è assolutamente indipendente, entrambi risultano idonei e applicabili al caso analizzato.

L'idea riguardo alla costruzione della geometria è stata la medesima in entrambi i software; per prima cosa è stato realizzato il dominio di calcolo, della forma di un parallelepipedo di dimensioni 300 x 50 x 50 m^3, in modo da renderlo sufficiente grande da non influenzare i risultati e allo stesso da non allungare troppo i tempi di calcolo.

A 40 m dalla sezione di ingresso dell'aria, all'interno del dominio, è stato posizionato il rigassificatore ORV, costruito come un parallelepipedo di dimensioni 16 x 8 x 8 m^3.

Il foro di rottura è stato realizzato come una sezione circolare avente diametro pari al diametro equivalente ottenuto tramite PHAST, ovvero del valore di 0.14 m, posizionato a metà del tubo rispetto al diametro di quest'ultimo.

Il tubo è stato costruito di forma cilindrica del diametro di 0.8 m e posizionato in modo tale che il foro di rilascio sia ad un'altezza pari ad un metro dal terreno.

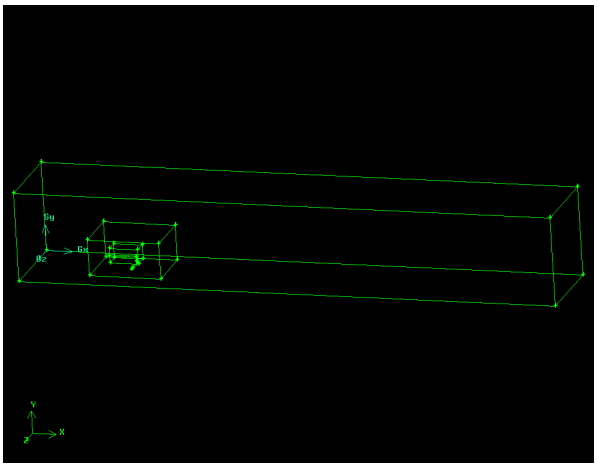

Figura 15 Geometria costruita con Gambit

Nella figura 15 si può notare come la geometria costruita in Gambit sia caratterizzata dalla presenza di un sottodominio, ossia un volume virtuale interno al dominio costruito per ottimizzare la griglia di calcolo.

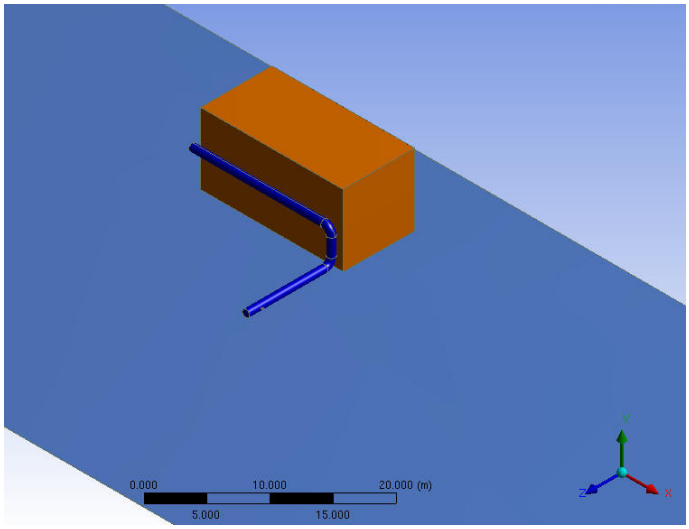

Figura 16 Geometria del caso studio in Ansys Fluent

3.4.3 Calcolo della portata uscente dal foro

Al fine di calcolare la portata massica per unità di superficie uscente dal foro, sono stati considerati i dati restituiti in output da PHAST. I dati considerati sono riportati nella seguente tabella:

Tabella 15 Dati utilizzati per il calcolo della portata

Grandezza	Valore
Densità del metano all'efflusso	0.940026532 kg/m^3
Velocità di fuoriuscita	376.62030 m/s

Con i dati riportati in tabella 15, è possibile procedere al calcolo della portata massica per unità di area come segue,

$$\frac{\dot{m}}{A} = \rho\, v \tag{72}$$

dalla quale si ottiene un valore pari a 356.9 kg/s/m^2. Il valore qui calcolato è stato utilizzato per l'impostazione della simulazione, come dato di partenza per definire quanto metano possa uscire dalla sezione di rilascio.

3.4.4 Griglia di calcolo

Tramite i due software GAMBIT e Worbench sono state realizzate le griglie di calcolo per le diverse fasi del metodo qui illustrato.
La griglia costruita ha previsto l'utilizzo di una griglia non strutturata, in cui sono stati utilizzati triangoli per la suddivisione delle facce, tetraedri per la suddivisione dei volumi.
Un'attenzione particolare è stata riservata ad alcune zone critiche all'interno del dominio, quali ad esempio la zona immediatamente a valle del foro di dispersione. I valori di velocità in questa zona sono molto elevati, occorre perciò realizzare una grigia di calcolo molto fitta in quest'area per non perdere dati tra una cella di calcolo e l'altra.
Al fine di modellare al meglio il getto, la mesh è stata realizzata costruendo, in una prima fase, tramite il software GAMBIT, un sottodominio, e in una seconda fase, tramite il software Workbench, un tronco di cono con la base minore a monte della sezione di rilascio e quella maggiore a valle, in modo da infittire il più possibile la zona coinvolta dal getto e allo stesso tempo non incrementare troppo il costo computazionale della simulazione.
La necessità di una mesh di calcolo molto fitta in alcune aree del dominio e la necessità comunque di dover risparmiare il più possibile sul numero di celle e di conseguenza sul costo computazionale hanno fatto si che, per la realizzazione della griglia, sia stata utilizzata una *size function*, ovvero una funzione che, partendo da valori di dimensioni di celle molto piccole, sia in grado di allargare le dimensioni delle celle secondo un rateo di crescita (*growth rate*) definito dall'utente. Tale funzionalità è disponibile sia nel software GAMBIT, sia nel software Workbench.
Dovendo dividere un dominio molto grande in celle molto piccole in alcune zone, la scelta di considerare un sottodominio è ragionevole; inoltre occorre precisare che un

valore troppo elevato di *growth rate* porterebbe ad un valore di *equisize skew* superiore allo 0.97, peggiorando così la qualità della mesh, mentre un valore troppo piccolo di *growth rate* porterebbe ad un eccessivo numero di celle di calcolo, allungando magari inutilmente i tempi della simulazione.

3.4.5 Boundary conditions

Viene ora mostrata al lettore una tabella riassuntiva delle condizioni al contorno impostate nella diverse fasi del lavoro effettuato.

Tabella 16 Boundary conditions utilizzate nelle fasi della modellazione

Superficie	**Boundary condition**
Ingresso del dominio	*Velocity inlet*
Cielo	*Velocity inlet* (fase 1,3) *Simmetry* (fase 2)
Laterali	*Velocity inlet* (fase 1,3) *Simmetry* (fase 2)
Uscita del dominio	*Pressure outlet*
Terreno	*Wall* (fase 1,3) *Simmetry* (fase 2,3) *Pressure outlet* (fase 3)
Foro di rilascio	*Mass flow inlet*
Tubo	*Wall*
ORV	*Wall*

Come si può notare dalla tabella 16, in questa trattazione, in tutte le diverse prove e simulazioni eseguite, la superficie di ingresso del dominio è sempre stata definita come *velocity inlet*, la sezione di rilascio come *mass flow inlet*, quella di uscita del dominio come *pressure outlet*, il tubo e l'ORV come *wall*.
Le altre, come verrà mostrato in seguito, variano a seconda del caso, mettendo così in evidenza alcuni aspetti rilevanti dello studio qui eseguito.

3.4.6 Fase 1

Per la risoluzione del problema, sono state costruite tramite il mesh editor Gambit 2.4.6, diverse griglie di calcolo; partendo da tre mesh realizzate per verificare l'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo, si è poi proseguito con la costruzione di altre due griglie, per ovviare, come si vedrà, ad alcuni problemi insorti.

3.4.6.1 Sottodominio fitto

Le caratteristiche delle prime tre griglie di calcolo sono caratterizzate dalle proprietà riportate nella tabella 17.

Tabella 17 Caratteristiche delle diverse mesh costruite nella fase 1

	Numero di celle	**Volume minimo delle celle [m³]**	**Volume massimo delle celle [m³]**
Mesh 1	1 734 653	$1.84\ 10^{-8}$	2.69
Mesh 2	4 154 796	$1.84\ 10^{-8}$	1.05
Mesh 3	4 635 912	$1.84\ 10^{-8}$	1

La geometria delle tre mesh indicate è esattamente la stessa; attorno alla geometria di riferimento è stato costruito un sottodominio di calcolo di dimensioni 40 x 20 x 30 m³ per infittire maggiormente le zone coinvolte dallo sviluppo del getto; le facce di tale sottodominio sono virtuali, ciò significa che ai fini della geometria non vengono considerate dal software di modellazione. Il foro di rilascio è stato posizionato a un metro dal terreno

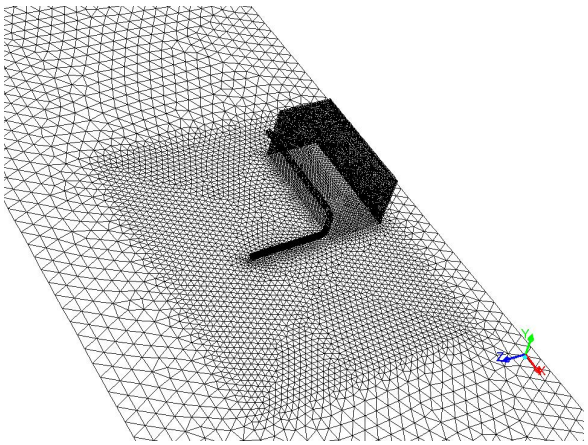

Figura 17 Esempio di griglia di calcolo della fase 1

3.4.6.2 Criteri di convergenza

Per la simulazione numerica in CFD sono stati considerati quali criteri di convergenza quelli identificati dalle regole di buona pratica, vale a dire i residui ridotti di tre ordini di grandezza e un controllo sui bilanci di materia in ingresso e uscita dal dominio di calcolo per verificarne l'attendibilità.

3.4.6.3 Risultati ottenuti

Considerando le tre griglie di calcolo, presentate nei pragrafi precedenti, sono stati ottenuti tre differenti risultati, come mostrato nelle seguenti figure 18, 19 e 20; ciascun grafico riporta un confronto tra il decadimento ottenuto dalle simulazioni in CFD e il modello analitico.

Pur non essendo confrontabile con un modello puramente analitico come quello proposto dal TNO, si può notare come l'andamento delle curve ottenute sia differente dal decadimento analitico in tutti i casi. Ciascuna curva mostra infatti, a differenza dell'andamento analitico, un gradino e uno scostamento dal modello analitico, nonostante le griglie di calcolo siano comunque state costruite seguendo le regole di buona pratica.

Si può dedurre inoltre come l'influenza del terreno possa essere un elemento da non sottovalutare dato lo scostamento dall'andamento analitico.

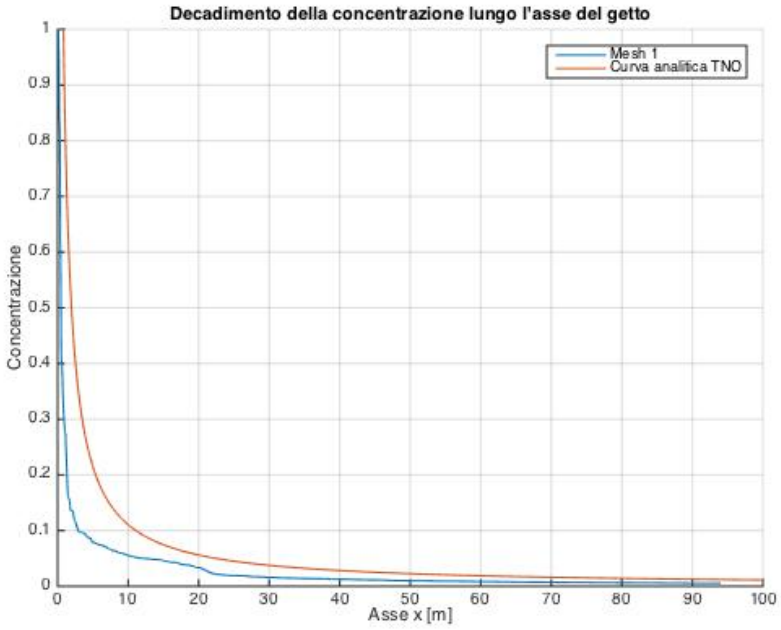

Figura 18 Risultati ottenuti dalla mesh 1

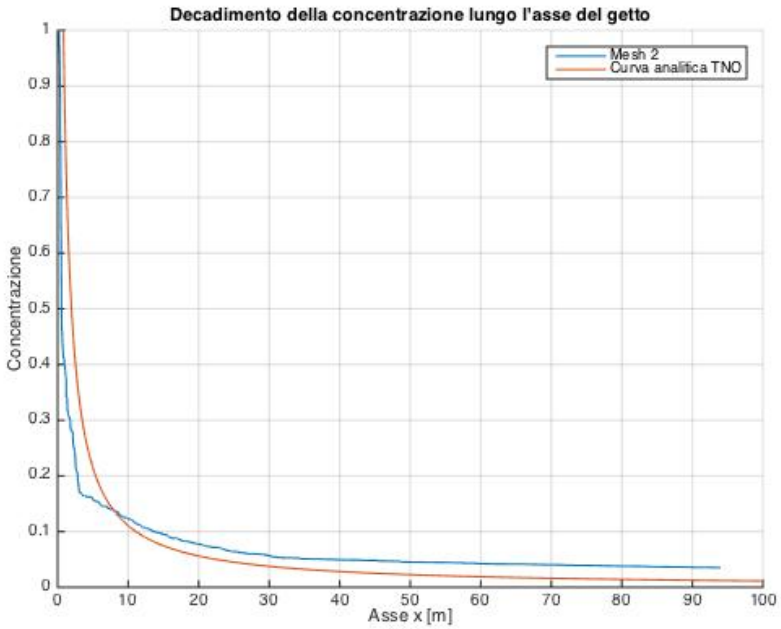

Figura 19 Risultati ottenuti dalla mesh 2

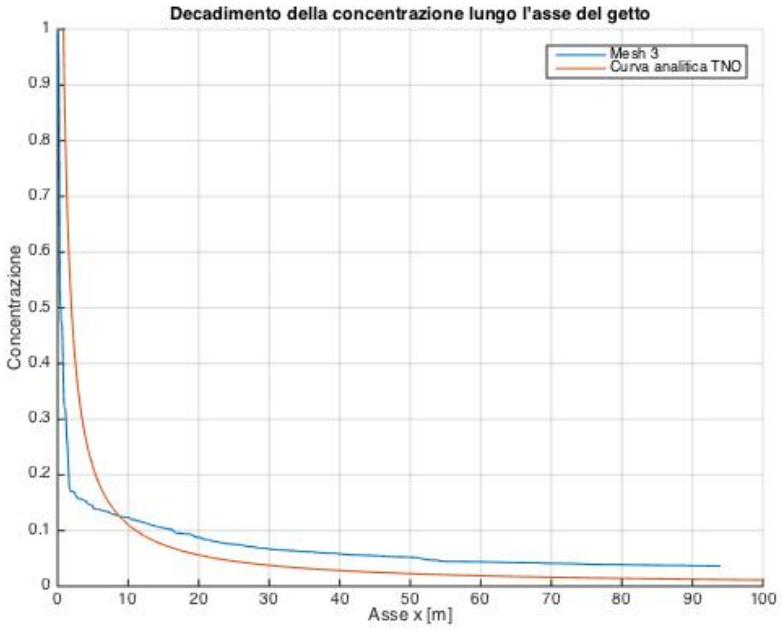

Figura 20 Risultati ottenuti dalla mesh 3

I valori delle distanze raggiunte da concentrazioni pari al limite inferiore di infiammabilità sono riportate nella tabella 18; vengono inoltre riportati i bilanci di materia, a dimostrare la convergenza delle simulazioni effettuate.

Tabella 18 Distanza di danno raggiunta e bilanci di massa

Griglia di calcolo	**Distanza raggiunta considerando una concentrazione pari a LFL**	**Bilancio di massa [kg/s]**
Mesh 1	25 m	- 0.011
Mesh 2	80 m	- 0.012
Mesh 3	80 m	- 0.004

Le distanze raggiunte dalla mesh 2 e dalla mesh 3 coincidono, il che permette di pensare che si sia raggiunta l'indipendenza dalla mesh; bisogna comunque considerare che il numero di celle delle due griglie è comunque simile.
In ogni caso, dai grafici presentati si nota invece il forte scostamento dall'andamento analitico, ed inoltre un gradino intorno ai 20, 30 m dovuto alla fine del sottodominio.

In quel tratto infatti la griglia di calcolo è caratterizzata da un brusco passaggio tra celle più piccole e celle più grandi di dimensioni, facendo così pensare alla necessità di allargare le dimensioni del sottodominio. Si può inoltre osservare un andamento non del tutto lineare, in particolare nella mesh 2 e nella mesh 3, nei primi metri, facendo intuire che la griglia di calcolo a ridosso della sezione di rilascio necessiti di particolare attenzione. Nel paragrafo che segue, vengono mostrate altre due griglie di calcolo caratterizzate da un allargamento del sottodominio.

3.4.6.4 Sottodominio allungato

Osservando i grafici presentati in figura 18, 19, 20 si nota la necessità di costruire delle nuove griglie di calcolo; le due griglie proposte in questa fase del lavoro di tesi q hanno una geometria del tutto analoga a quelle della fase precedente, ad eccezione delle dimensioni del sottodominio, questa volta di dimensioni pari a 70 x 20 x 30 m^3. Nella figura 21 si può notare il confronto tra il sottodominio precedente e quello considerato per queste simulazioni.

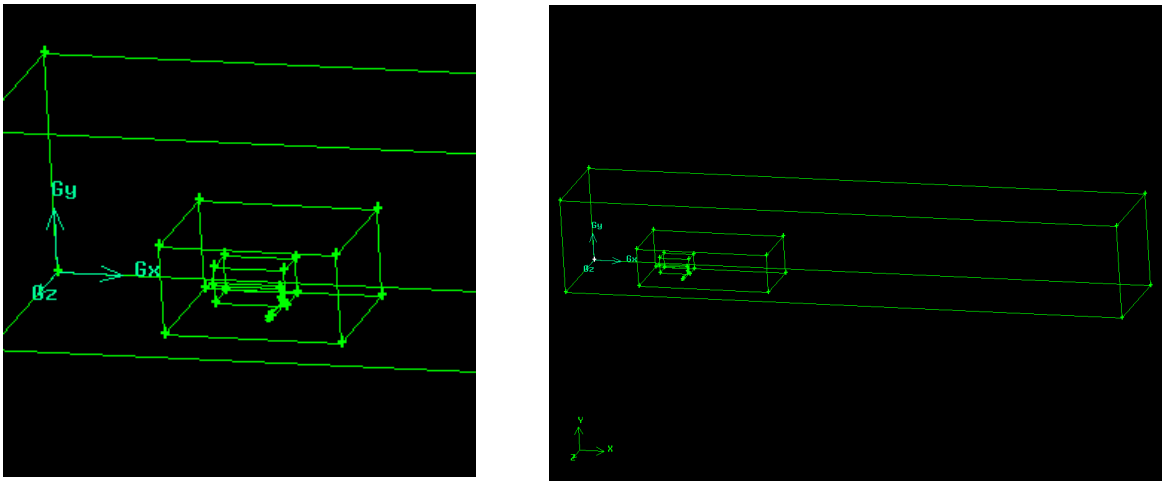

Figura 21 Confronto tra il sottodominio della prima fase a sinistra e il sottodominio allargato della seconda fase

Le griglie considerate sono riportate nella tabella seguente.

Tabella 19 Caratteristiche delle diverse mesh costruite nella fase 2

	Numero di celle	**Volume minimo delle celle [m³]**	**Volume massimo delle celle [m³]**
Mesh 4	3 124 115	$1.84\ 10^{-8}$	1.543
Mesh 5	7 468 514	$1.84\ 10^{-8}$	$4.72\ 10^{-1}$

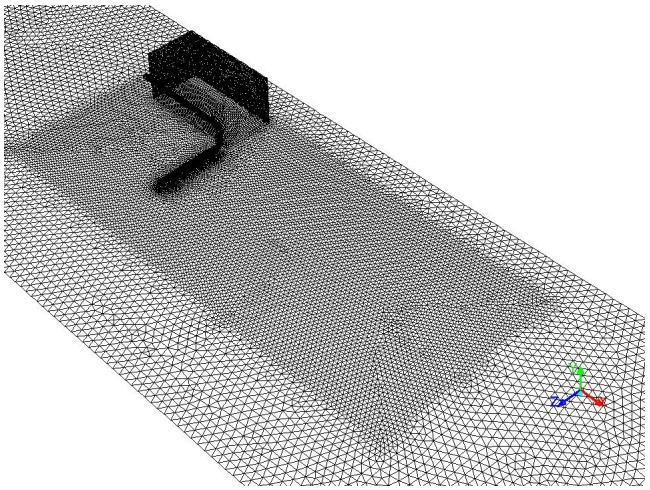

Figura 22 Esempio di griglia di calcolo costruita con il sottodominio allungato

I risultati ottenuti, seguendo le impostazioni della simulazione e i criteri di convergenza già precedentemente indicati, sono in figura 23 e in figura 24; come nel caso precedente i grafici riportano un confronto con il decadimento analitico.

Le immagini mostrano effettivamente la riduzione del gradino, prova del fatto che si trattasse effettivamente di un alto gradiente nelle dimensioni delle celle a ridosso della fine del sottodominio; purtroppo però, rimangono ancora scostamenti significativi tra l'andamento analitico e quello ricavato con il software Fluent.

Le distanze di danno raggiunte nei due casi sono riportate nella tabella 20.

Tabella 20 Distanza di danno raggiunta

Griglia di calcolo	**Distanza raggiunta considerando una concentrazione pari a LFL**	**Bilancio di massa [kg/s]**
Mesh 4	80 m	- 0.0002
Mesh 5	80 m	0.004

I risultati sono concordi con quelli della mesh 2 e della mesh 3, ma pienamente differenti da quelli ricavati in una prima analisi con il modello del TNO e con il software PHAST.

A questo punto ci si è domandati se il problema fosse dovuto alla costruzione della mesh, ad un problema legato all'utilizzo del software CFD o alla presenza del terreno.

Per eliminare ogni sorta di dubbio, si è dunque pensato di simulare un *free jet* in CFD e verificare la validità dei risultati ottenuti tramite un confronto con il modello analitico e quello integrale, andando poi a modificare la geometria e le condizioni al contorno pian piano in modo da avvicinarsi sempre più al caso reale, come verrà mostrato nel paragrafo successivo.

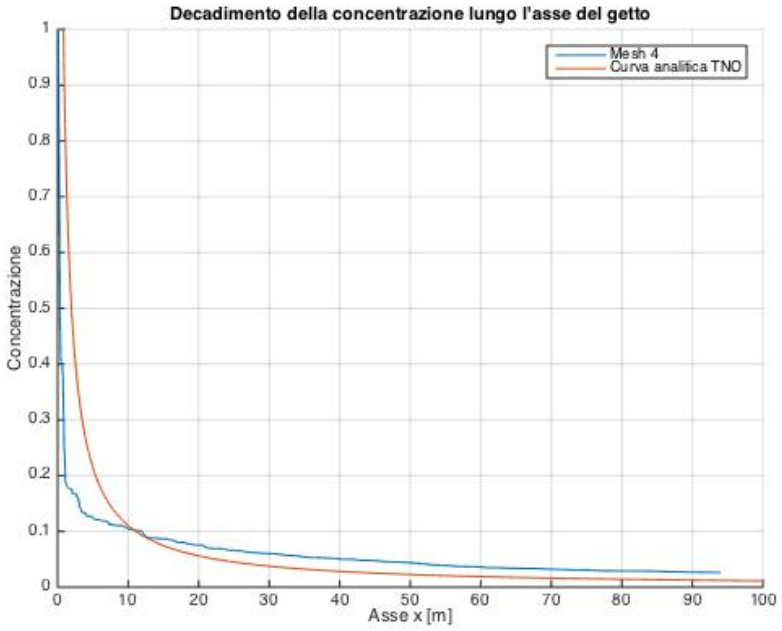

Figura 23 Risultati ottenuti dalla mesh 4

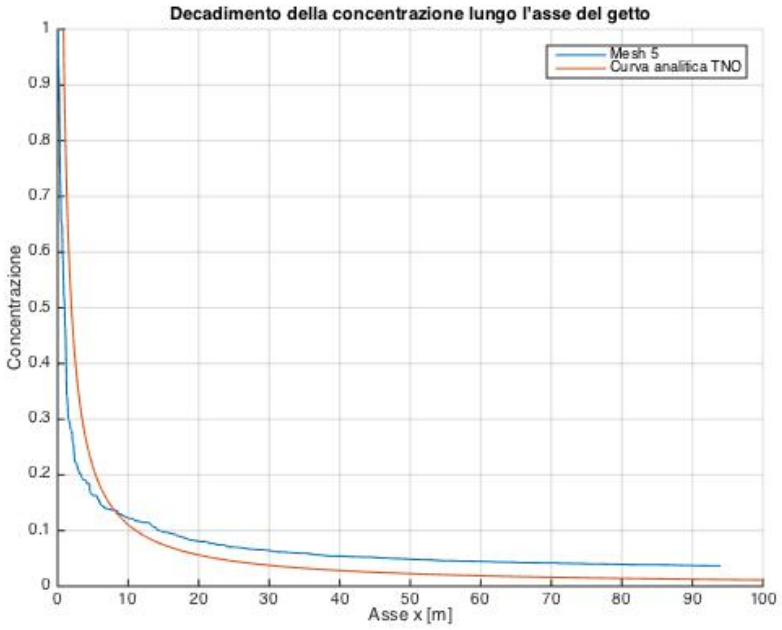

Figura 24 Risultati ottenuti dalla mesh 5

3.4.7 Fase 2 - Simulazione di un getto libero in CFD

Come nei casi precedenti, per la simulazione di un getto libero sono state costruite diverse griglie di calcolo, per dimostrare e garantire l'indipendenza dalla mesh; le tre mesh proposte, realizzate tramite il software Workbench 15, sono caratterizzate da diversi numeri di celle, come riportato nella tabella 21.

Tabella 21 Caratteristiche delle diverse mesh costruite nella fase 2

	Numero di celle	**Volume minimo delle celle [m3]**	**Volume massimo delle celle [m3]**
Mesh 6	2 775 167	$3\ 10^{-7}$	1.07 10
Mesh 7	5 082 874	$2.72\ 10^{-7}$	3.5985
Mesh 8	10 965 647	$1.75\ 10^{-7}$	9.22

La geometria delle tre mesh indicate nella tabella precedente è la stessa e consiste nel foro di rilascio posizionato ad un'altezza questa volta pari a 25 m dal suolo, per

simulare il più possibile la condizione di getto libero e rendere il tutto confrontabile con la soluzione analitica.

Le dimensioni del dominio e della sezione di rilascio rimangono invariate ma per evitare il gradino che nei casi precedenti appariva e per ottenere una mesh che segua maggiormente la fisica del fenomeno, si è deciso di costruire un tronco di cono al posto del sottodominio precedente, con origine a 0.4 m a monte della sezione di rilascio, quindi internamente al tubo. Così facendo, è possibile infittire maggiormente l'area coinvolta dal getto ed allargare le celle in quelle parti del volume di controllo dove in realtà non è necessario un grado di infittimento elevato.

Nella figura 25 è possibile osservare il tronco di cono costruito per migliorare l'accuratezza della zona interessata dal getto.

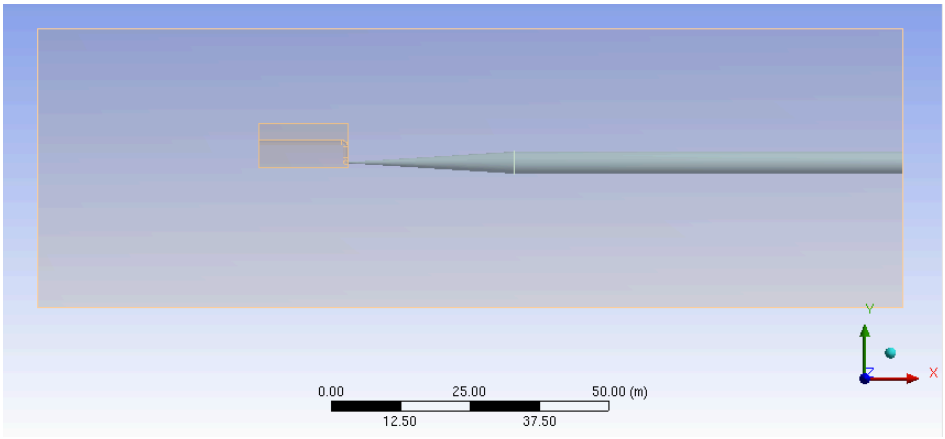

Figura 25 Geometria realizzata con Workbench 15 per free jet

3.4.7.1 Impostazione delle simulazione per *free jet*

Le impostazioni della simulazioni sono le medesime per le tre mesh illustrate in tabella 21; il foro è stato definito come *mass flow inlet*, inserendo un valore di portata massica per unità di superficie pari a 356.9 kg/m²/s, l'ingresso del dominio è stato definito come *velocity inlet,* con un valore di velocità dell'aria in ingresso pari a 5 m/s, valore costante in direzione parallela all'asse del getto, la superficie di uscita del

dominio è stata definita come *pressure outlet,* con valori di k e ε riferiti al *backflow* rispettivamente pari a 0.1 e 0.01.
La superficie superiore del dominio, i laterali e il terreno sono stati definiti come *simmetry*, questo per portarsi il più possibile in una situazione confrontabile con quella di un getto libero descritto dalla trattazione analitica.
La gravità in questa terza fase non è stata presa in considerazione, poiché il modello analitico non la prevede.

3.4.7.2 Risultati ottenuti

Per le diverse griglie di calcolo si è ottenuto lo stesso decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto, come mostrato in figura 26, perfettamente allineato con quello dettato dalla trattazione analitica del TNO.

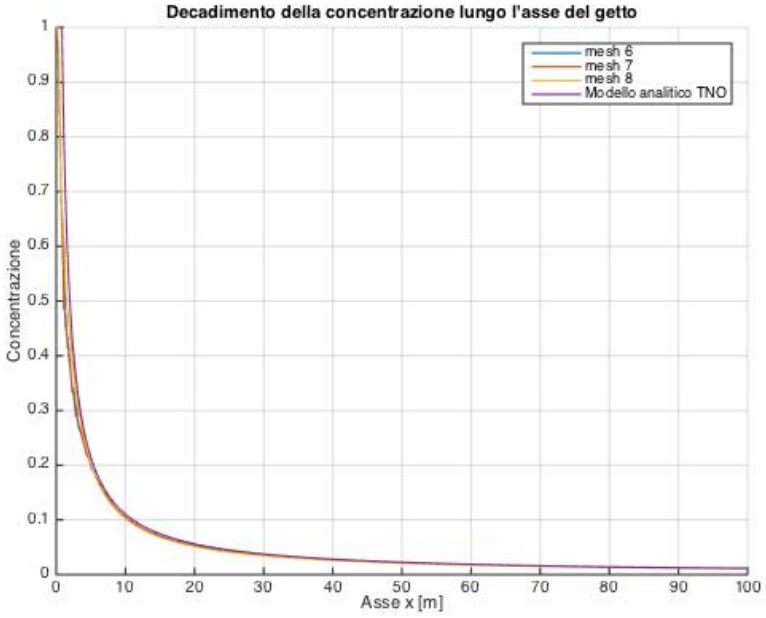

Figura 26 Confronto del decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto per free jet con modello del TNO

Viene riportato un ulteriore confronto, nel grafico di figura 27, tra i risultati ottenuti dalla mesh 6, dalla mesh 7 e dalla mesh 8 e quelli ricavati dal software Phast.

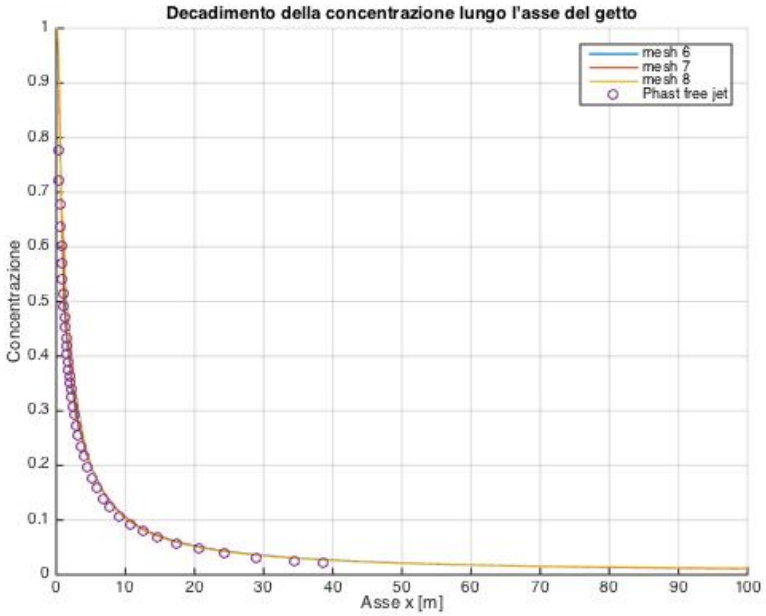

Figura 27 Confronto del decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto per free jet con PHAST

Le distanze di danno, considerando una concentrazione pari al limite inferiore di infiammabilità, sono riportate nella tabella 22, in cui per completezza vengono riportate nuovamente le distanze di danno calcolate dal modello analitico e da PHAST e i bilanci di materia per la mesh 6, la mesh 7 e la mesh 8.

Tabella 22 Distanza di danno raggiunta dal free jet, dal modello analitico e da PHAST

Griglia di calcolo	**Distanza raggiunta considerando una concentrazione pari a LFL**	**Bilancio di massa [kg/s]**
Mesh 6	25 m	0.0003
Mesh 7	25 m	$-3.69\ 10^{-5}$
Mesh 8	25 m	- 0.008
Modello analitico TNO	26 m	/
Modello integrale PHAST	24 m	/

Si nota come i risultati delle tre mesh utilizzate siano concordi, il che sottolinea l'indipendenza dalla griglia di calcolo e come siano paragonabili con quelli già ricavati in precedenza tramite il modello analitico del TNO e il software PHAST.
Particolare attenzione va inoltre riposta nella maggiore efficacia ai fini della simulazione numerica, del volume a forma di tronco di cono posto attorno alle celle coinvolte nello sviluppo del getto; si ritiene infatti che il tronco di cono eviti il gradino, facendo si che le curve abbiano così lo stesso andamento della curva analitica, senza la possibilità dunque di incorrere in una perdita significativa di dati nella zona immediatamente a valle della sezione di rilascio come invece accadeva per i casi con i due diversi sottodomini.
Inoltre l'assenza del terreno permette di ricondurre il comportamento di un getto assimilabile a quello di un getto libero, come dimostrato dalla sovrapposizione delle curve ottenute con quelle analitiche.
A questo punto, modificando nuovamente la geometria del problema, si è deciso di riposizionare il foro di rilascio ad un'altezza pari ad un metro dal suolo, per verificare e valutare l'effetto del terreno sullo sviluppo del getto, variando le condizioni al contorno della superficie rappresentativa del terreno.

3.4.8 Fase 3 – Reinserimento del terreno

Nella terza fase del lavoro qui presentato si è deciso di riportare il foro ad un metro dal terreno, mantenendo gli accorgimenti utilizzati precedentemente nella costruzione della griglia. Il dominio di calcolo è stato ridotto rispetto ai casi precedenti, per ridurre i tempi di calcolo della simulazione. Le dimensioni del dominio considerato sono 200 x 30 x 50 m^3, essendo ormai a conoscenza che un valore pari a 200 m in direzione parallela all'asse del getto è sufficiente a contenere tutto lo sviluppo del getto.
La geometria costruita è dunque la seguente:

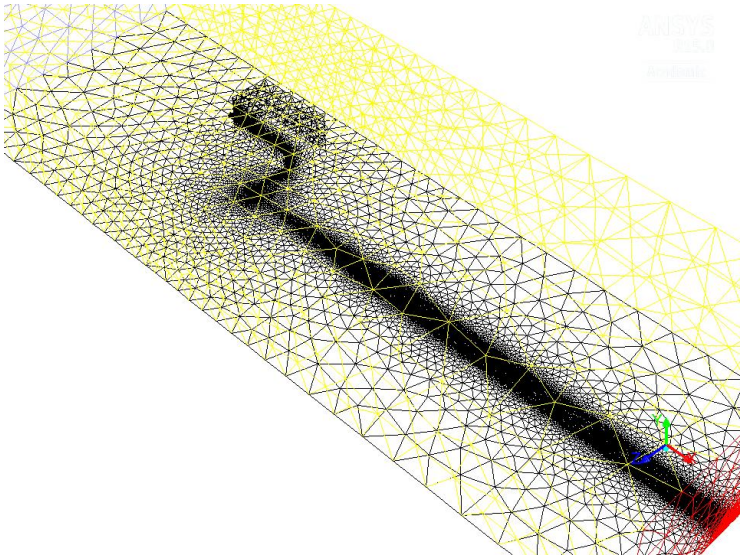

Figura 28 Mesh 9

Si può notare come l'accorgimento di costruire un tronco di cono a valle della sezione di rilascio per infittire maggiormente la zona interessata dal getto sia stato mantenuto.
La griglia di calcolo proposta è solo una, costituita dalle proprietà riportate nella tabella 23.

Tabella 23 Caratteristiche della mesh 9

	Numero di celle	**Volume minimo delle celle [m³]**	**Volume massimo delle celle [m³]**
Mesh 9	2 126 707	$3.3131\ 10^{-7}$	8.8166 10

3.4.8.1 Impostazione della simulazione per la fase 3

Le impostazioni utilizzate sono state le medesime delle fasi precedenti, aggiungendo però in questo caso l'effetto della gravità, per renderlo il più simile possibile al caso reale, e affrontando due diversi casi, il primo impostando il terreno come *simmetry*, il secondo come *wall*.
I risultati, illustrati nei paragrafi che seguono, mostreranno come l'effetto del terreno sia rilevante se posto a distanze sufficientemente vicine al getto.

3.4.8.2 Terreno impostato come *simmetry*

Impostando in un primo caso il terreno come *simmetry* nelle *boundary conditions* di Fluent si è ottenuto il decadimento della concentrazione riportato nella figura 29, confrontato come per gli altri casi, con l'andamento analitico.

Si può notare come i risultati questa volta non siano troppo discordanti, come invece accadeva per i casi analizzati nella fase 1.

L'andamento della curva è lo stesso, e le distanze di danno raggiunte divergono di qualche metro. In questo caso infatti la distanza raggiunta da una concentrazione pari al limite inferiore di infiammabilità è pari a 35 m, mentre dal modello analitico del TNO e dalle mesh della fase 2 si ottenevano delle distanze rispettivamente pari a 26m e 25 m.

Il bilancio di materia ottenuto per questo caso è pari -4,764 10^{-5} $\frac{kg}{s}$.

A questo punto, occorre impostare il terreno come *wall*, per ricondurre il lavoro illustrato al caso reale che si vuole analizzare.

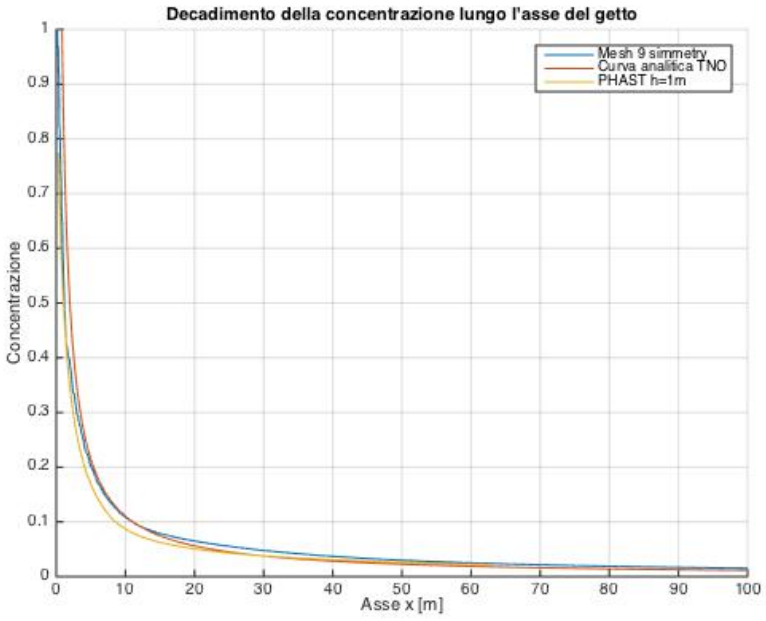

Figura 29 Decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto impostando il terreno come simmetry

3.4.8.3 Terreno impostato come *wall*

Una volta impostata la superficie rappresentativa del terreno come *wall*, è stato ricavato l'andamento riportato in figura 30.

E' possibile notare come anche in questo caso l'andamento sia lo stesso di quello ricavato dal modello proposto dal TNO, ma la curva, soprattutto nel tratto orizzontale, risulta traslata verso l'alto; questo fenomeno è dovuto alla presenza del terreno, ovvero alla presenza di una superficie sulla quale il metano, dotato di inerzia con la quale il getto si propaga, rimbalza per riportarsi in sospensione nell'aria per qualche metro, così dunque da consentire al getto di prolungarsi per distanze maggiori. In questo caso infatti, la distanza raggiunta dal getto, considerando il valore di LFL, è pari a 80 m, in accordo con i primi risultati ottenuti nella fase 1.

Il bilancio di materia ottenuto per questo secondo caso è pari 0.2 $\frac{kg}{s}$.

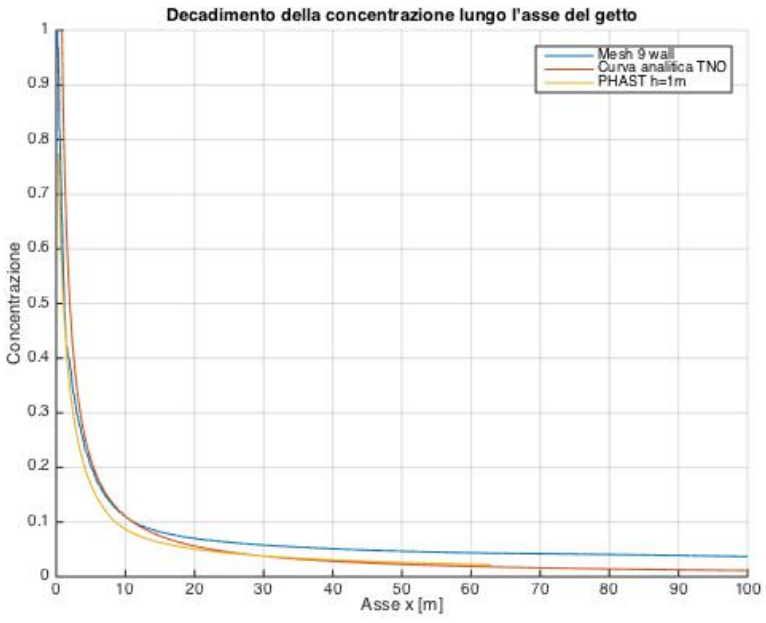

Figura 30 Decadimento della concentrazione lungo l'asse del getto impostando il terreno come wall

3.4.9 Impostazione della simulazione

Per quanto riguarda l'impostazione del caso studio qui proposto, è stato considerato stazionario, per coerenza e rendere l'analisi confrontabile con PHAST 6, il modello di turbolenza utilizzato è stato il k-ε per rendere i risultati comparabili con altri casi studiati applicando tale modello; in letteratura il modello k-ω viene maggiormente indicato per la simulazione di getti in CFD; per ovviare tale discordanza, è stato eseguito un confronto tra due analisi del getto, considerando la mesh 6 precedentemente descritta, una utilizzando il k-ε, l'altra utilizzando il k-ω, per verificare un'eventuale alterazione dei risultati o meno.
I risultati ottenuti dal confronto tra i due modelli sono assolutamente allineati, come riportato nel grafico di figura 31. L'evidenza dei risultati ottenuti pertanto indica che l'errore commesso nell'utilizzare il modello k-ε anziché il modello k-ω è trascurabile.

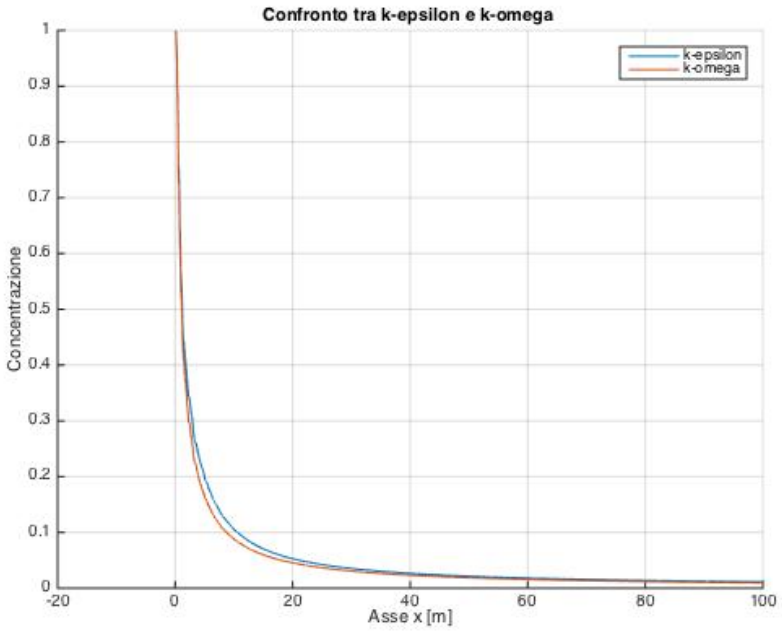

Figura 31 Confronto dei risultati ottenuti applicando i due modelli di turbolenza

Per quanto riguarda le condizioni atmosferiche, è stata considerata una velocità del vento in ingresso pari a 5 m/s nella direzione orizzontale parallela all'asse del getto stesso.

La simulazione del getto si è basata inoltre sul modello di trasporto delle specie, il quale prevede la miscelazione tra fluidi puri, considerando perciò la diluizione tra il metano e l'aria.

3.4.10 Metodologia

Arrivati a questo punto del lavoro di tesi illustrato, si vuole porre l'attenzione del lettore su quali sono stati i punti più rilevanti:

- Costruzione della griglia seguendo le regole di buona pratica.
- Impiego di accorgimenti nella *mesh* per infittire le zone di maggior interesse, come ad esempio l'utilizzo del tronco di cono.
- Verifica dei parametri di qualità relativi alla *mesh*.
- Verifica del rispetto dei criteri di convergenza per la simulazione.
- Verifica dell'indipendenza dei risultati dalla griglia di calcolo.
- Convalida delle impostazioni e dei risultati ottenuti con i risultati ricavati da modelli già ampiamente convalidati, come quelli analitici, in un caso semplificato.
- Modifica delle impostazioni e delle condizioni al contorno per ricondurre il caso teorico confrontabile con quello reale.

Nel momento in cui vengono modificate le condizioni al contorno è necessario prendere coscienza che non è più possibile confrontare i risultati ottenuti con modelli già convalidati.
Per quanto concerne le impostazioni di Fluent, si è visto, nello sviluppo del lavoro qui presentato, che esistono diversi modelli di turbolenza; la scelta del modello di turbolenza da utilizzare va eseguita con consapevolezza e ragionevolezza da parte dell'utente, il quale, nel caso non dovesse avvalersi del modello più adeguato indicato dalla letteratura, deve comunque preoccuparsi di monitorare l'errore commesso e giudicare l'eventuale trascurabilità di quest'ultimo.

CONCLUSIONI

Il lavoro di tesi proposto si è preoccupato di mettere in luce alcuni dei problemi che possono insorgere nella simulazione di un getto caratterizzato da alta pressione.
Partendo da una prima analisi analitica, si è voluto proseguire poi con un confronto e un parallelismo tra i modelli integrali e i modelli tridimensionali.
In particolare, va riposta attenzione sui risultati ottenuti tramite i modelli integrali.
Si è visto infatti dalle analisi eseguite come per i modelli integrali l'influenza del terreno non sia rilevante come invece accade per i modelli tridimensionali.
Ciò che accade in prossimità del terreno è che il getto costretto a scontrarsi contro il terreno, viene riflesso, subendo una maggiorazione della propria estensione; tale maggiorazione viene parzialmente considerata dai modelli integrali, ben interpretata però dai modelli tridimensionali. E' doveroso però precisare che i modelli integrali tengono conto dell'impingement subito dal getto nella parte finale di dispersione, quella di dispersione passiva, tramite un parametro α. Uno dei possibili sviluppi futuri potrebbe dunque essere un confronto tra i vari modelli considerando anche la fase di dispersione passiva, per verificare effettivamente come i modelli integrali tengano conto del contesto.
I modelli tridimensionali riescono invece a rilevare pienamente la presenza del terreno, come si è visto dai risultati ottenuti. La mancanza però di un confronto di questi con un modello convalidato rende necessaria una valutazione critica dei risultati ottenuti.
I modelli CFD, più precisi e accurati, risultano però più costosi ed onerosi dal punto di vista computazionale, risulta pertanto necessario comprendere quando dover assolutamente affidarsi a questi anziché a modelli meno dispendiosi.
Il lavoro proposto vuole indicare alcune regole generali per poter garantire il più possibile l'accuratezza dei risultati ottenuti tramite la CFD, sottolineando inoltre l'importanza di quest'ultima nella modellazione di un getto in geometrie complesse che non possono essere riprodotte dai modelli integrali.

L'analisi proposta non vuole assolutamente porsi come metodo da seguire, ma vuole solamente focalizzare l'attenzione del lettore su quali possono essere i problemi e le anomalie riscontrabili nella simulazione di un getto tramite la CFD nel caso in cui questo non sia modellabile tramite un modello integrale.

Le analisi per arrivare a un criterio generale sono ancora molte; in particolare potrebbe essere svolta un'indagine per capire in maniera più approfondita quando l'influenza di altri elementi risulta effettivamente non trascurabile; a questo proposito si potrebbe pensare di effettuare un'analisi dettagliata variando l'altezza del rilascio per individuare quando il terreno effettivamente comincia a influenzare il getto o meno.

Inoltre può risultare molto interessante analizzare l'introduzione di eventuali ostacoli dinnanzi al getto, per verificare come la turbolenza del fenomeno sia modificata rispetto al caso in campo aperto.

I dati da raccogliere e le analisi da compiere sono dunque ancora molti prima di poter arrivare ad una piena comprensione di tutti i possibili scenari riscontrabili.

RINGRAZIAMENTI

Dedico la stesura di questo lavoro di tesi alla mia famiglia; voglio ringraziare in particolar modo i miei genitori, dai quali ho imparato tanto e che mi hanno insegnato ad agire sempre secondo coscienza, educazione e lealtà verso le altre persone.
Ringrazio mia sorella Ida, sempre pronta a sostenermi e a difendermi e alla quale auguro felicità e serenità.
Un importante ringraziamento va alla prof.ssa Valentina Busini, nonché relatrice di questo lavoro, per i numerosi insegnamenti impartiti non solo durante le sue lezioni.
Non posso a questo punto non menzionare l'ing. Matteo Rizzotto e l'ing. Simone Favrin per il prezioso contributo che hanno fornito alla stesura di questo lavoro di tesi e per le numerose attenzioni che mi hanno dedicato nel corso di questi mesi.
Un importante e doveroso ringraziamento è rivolto all'ufficio HSE della Bayer Healthcare Manufacturing s.r.l. del polo di Garbagnate Milanese; in particolar modo ringrazio profondamente la dott.ssa Chiara Simondi per l'umanità e le premurose attenzioni che mi ha mostrato in questi mesi, agevolando sicuramente la realizzazione di questo lavoro; ringrazio la dott.ssa Alessia Faustini e il dott. Andrea Tiraboschi per la cordialità e l'amabilità con cui mi hanno accolto presso il loro ufficio.
Un caloroso ringraziamento è rivolto agli amici che mi hanno accompagnato fino al raggiungimento di questo importante traguardo; voglio ringraziare in particolar modo Chiara, Ester, Cristian, Luca e Marco senza i quali alcuni momenti sarebbero stati senza dubbio più difficili e ai quali porgo i miei migliori auguri per un futuro prospero e pieno di soddisfazioni.
Ringrazio i miei amici Monica, Piera, Emanuele e Roberto, con i quali ho iniziato il mio percorso accademico ormai concluso, e che continuano ad accompagnarmi nella vita privata, costituendo un importante punto di riferimento.

BIBLIOGRAFIA

[1] A.V. Eremin, V.A. Kochnev, A.A. Kulikovskii, I.M. Naboko, *Nonstationary processes in starting strongly underexpanded jets,* J. Appl. Mech. Tech. Phys. 19 (1978) 27-31

[2] V.V. Golub, *Development of shock wave and vortex structures in unsteady jets,* Shock Waves 3 (4) (1994) 279-285

[3] N.G. Korobeishchikov, A.E. Zarvin, V.Zh. Madirbaev, *Hydrodynamics of pulsed supersonic underexpanded jets: spatiotemporal characteristics,* Tech. Phys. 49 (8) (2004) 973-981

[4] R. Ishii, H. Fujimoto, N. Hatta, Y. Umeda, *Experimental and numerical analysis of circular pulse jets,* J. Fluid Mech 392 (1999) 129-153

[5] R. Khaksarfard, M.R. Kameshi, M. Paraschivoiu, *Numerical Simulation of high pressure release and dispersion of hydrogen into air with real gas model,* Shock Waves 20 (2010) 205-216

[6] K.Abdol-Hamid, R. Wilmoth, *Multiscale turbolence effects in underexpanded supersonic jets, AIAA J. 27 (1989) 315-322*

[7] A.D.Birch, D.R. Brown, M.G. Dodson, F. Swaffield, The *Structure and Concentration Decay of High Pressure Jets of Natural Gas,* Combustion Science and Technology, (1984) 36:5-6, 249-261

[8] F. Péneau, G. Pedro, P. Oshkai, P.Bérnard, N. Djilali, *Transient supersonic release of hydrogen from a high pressure vessel : a computational analysis,* Int. J. Hydrog. Energy 34 (14) (2009) 5817-5827 (2nd International Conference on Hydrogen Safety)

[9] M.I. Radulescu, C.K. Law, *The transient start of supersonic jets,* J. Fluid Mech. 578 (2007) 331-369

[10] T.C. Adamson, J.A. Nicholls, *On the structure of jets from highly underexpanded nozzles into still air, J. Aerospace Sci. 26 (1959) 16-24*

[11] H.B.Awbi Ventilation of Buildings (II ed.), London: Spon Press 2003

[12] D. C. Wilcox, *Turbolence modeling for CFD (III ed.),* DCW Industries (2006)

[13] V.V. Baturin *Fundamentals of industrial ventilation,* Pergamon, Oxford (1972)

[14] E. Förthmann *uber turbulent strahalausbreitung,* Ing. Arch. 5, 42 (English translation NACA TM 789) (1936)

[15] N. Rajaratnam *Turbolent jets,* Elsevier, Amsterdam (1976)

[16] TNO, *Methods for the calculation of physical effects "Yellow Book", CPR 14E. (Part 1 & 2).* Comittee for the Prevention of Disasters, Directorate-General of Labour of the Ministry of Social Affairs and Employement. The Hague.

[17] A.C.Y. Yuen, G.H. Yeoh, R.K.K. Yuen, T. Chen, *Numerical Simulation of a Ceiling jet fire in a Large Compartment,* Procedia Engineering 52 (2013) 3-12

[18] Ricou F.P., Spalding B.D. *Measurement of entrainment by axisymmetrical turbulent jets,* Journal of Fluid Dynamics 11, (1961), 21-32

[19] R. Rota, *Fondamenti di termodinamica dell'ingegneria chimica,* Pitagora (2004)

[20] R. Rota, G. Nano, *Introduzione alla affidabilità e sicurezza nell'industria di processo,* Pitagora editrice, Bologna (2007)

[21] A.V. Antsupov, *General properties of underexpanded and overexpanded supersonic gas jets,* Sov. Phys. Tech. Phys. 19 (2) (1974) 234-238

[23] A.B. Bauer, *Normal Shock location of underexpanded gas-particle jets,* AIAA J. 3 (6) (1965) 1187-1189

[24] P.S. Cumber, M. Fairweather, S.A.E.G. Falle, J.R. Giddings, *Predictions of the structure of turbulent, highly underexpanded jets,* J. Fluids Eng. 117 (4) (1995) 599-604

[25] E. Rajakuperan, M,A, Ramaswamy, *An experimental investigation of underexpanded jets from an oval sonic nozzle,* Exp. Fluids 24 (4) (1998) 291-299

[26] A.R. Vick, E.H. Andrews, J.S. Dennard, C.B. Craidon, *Comparisons of experimental free jet boundaries with theoretical results obtained with the method of characteristics,* Technical Note D2327, NASA (1964)

[27] M.G. Cooper, *A model for jet dispersion in a congested environment,*

Advantica Technologies Limited, (2001)

[28] A.J. Saddington, N.J. Lawson, K. Knowles, *An experimental and numerical investigation of under-expanded turbulent jets,* Aeronautics J. 108 (1081) (2004) 145-152

[29] Ansys, *Ansys Fluent Theory Guide, (2013)*

[30] Ansys, Ansys Fluent Users Guide, (2015)