Università degli Studi di Roma Tre

DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA CIVILE
Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Civile per la Protezione dai Rischi Naturali

Relazione di fine tirocinio

Applicazione del codice di calcolo FLACS versione 10.4

Modellazione di un'esplosione in ambiente semi-confinato

Studente:
Federico D'Arcadia
Matricola 439565

Tutor:
Prof. Giampiero Sciortino

Anno Accademico 2015-2016

Sommario

La seguente relazione descrive le attività svolte ai fini dello svolgimento della tesi di laurea, con particolare riferimento allacquisizione di ulteriori conoscenze informatiche nel campo della fluidodinamica computazionale. Tali attività sono previste dallart. 10, co. 5 let. d/e e considerate equivalenti al tirocinio; lo svolgimento delle attività di seguito illustrate corrisponde al riconoscimento di 3 CFU per un numero di ore non inferiore a 75. Le attività si sono svolte nel periodo 1/06/2016 – 30/06/2016 presso il Dipartimento di Ingegneria Civile situato in Via Vito Volterra, 62. Lobiettivo è consistito nell'approfondire le conoscenze relative allapplicazione di un software di fluidoinamica computazionale per la simulazione di eventi di dispersione ed esplosione di gas in ambiente 3D.

Nella presente relazione si fa riferimento al codice di calcolo commerciale FLACS, sviluppato dalla GexCon, il quale è un codice CFD (*Computational Fluid Dynamics*) che calcola la pressione dovuta all'esplosione ed altri parametri legati al flusso come funzioni dello spazio e del tempo al variare della geometria e degli scenari considerati. FLACS tiene inoltre conto dell'interazione tra onda di combustione, aree di sfogo e ostacoli fisici quali arredamenti, tubazioni ed equipaggiamenti. Sviluppi recenti hanno incluso nel software la capacità di simulare la dispersione di gas in geometrie complesse con o senza vento e con la presenza di getti diffusivi e ad elevata quantità di moto.

Nei capitoli successivi, ad una breve introduzione sul programma segue una descrizione delle equazioni dei gas comprimibili e dei modelli alla base del software, oltre che delle caratteristiche delle diverse tipologie di simulazione e delle linee guida che lutente può implementare per l'adeguata modellazione delle conseguenze di un fenomeno esplosivo in ambiente semi-confinato.

Indice

1 Il software FLACS **4**

2 Modellistica alla base del software **7**
2.1 Modello matematico 7
2.2 Equazioni dei gas comprimibili 9
2.2.1 Turbolenza 13
2.3 Modello fisico-chimico 13
2.3.1 Combustione 14
2.3.1.1 Reazione stechiometrica 15
2.3.1.2 Il FLACS *Flame Model* 16
2.3.1.3 Velocità di combustione 17
2.4 Schemi numerici 18

3 Simulazione di un'esplosione semi-confinata **20**
3.1 Geometria 22
3.2 Griglia computazionale 22
3.2.1 Linee guida per la realizzazione della griglia 25
3.3 Scenario 26
3.3.1 Punti di misura *(Monitor points)* 26
3.3.2 Pannelli di riduzione della pressione *(Pressure relief panels)* 28
3.3.3 Condizioni al contorno 30
3.3.4 Condizioni iniziali 31
3.3.5 Caratteristiche del gas combustibile 33
3.3.6 Innesco 33
3.3.7 Output variabili di campo 3D 34
3.4 Porosità 35
3.5 Simulazione 36
3.6 Post-processing 37

4 Conclusioni **42**

Elenco delle figure

1.1 Dispersione di gas in edificio ventilato : volume di gas infiammabile 5
1.2 Esplosione in piattaforma *off-shore* 5

3.1 Finestra del database della geometria in CASD 21
3.2 Geometria 3D in CASD 23
3.3 Sezione di una griglia che mostra i nodi interni ed al contorno . . . 23
3.4 Strumento di creazione della griglia *(Quick Grid)* 24
3.5 Griglia computazionale nelle 3 direzioni principali x-y-z 25
3.6 Scelta di uno scenario d'esplosione di gas 27
3.7 Inserimento dei punti di misura 27
3.8 Modalità di posizionamento dei punti di misura 28
3.9 Esempio di pannello di rilascio della pressione 29
3.10 Definizione delle condizioni al contorno 30
3.11 Definizione delle condizioni iniziali 32
3.12 Definizione della nube di gas combustibile e della sua composizione 33
3.13 Modalità di posizionamento dell'innesco 34
3.14 Scelta delle variabili di campo da fornire in output 35
3.15 Riquadro informativo mostrato in modalità di verifica delle porosità in Flowvis 4 36
3.16 Simulazione in FLACS *Run Manager* 37
3.17 Finestra principale di Flowvis 5 38
3.18 Grafici pressione-tempo 39
3.19 Grafico 2D dei prodotti della combustione e del vettore velocità ad una quota ed un istante temporale fissati 39
3.20 Grafico 3D con pressione e prodotti della combustione 40
3.21 Interfaccia dello strumento di estrazione dei risultati Gutils 41

Elenco delle tabelle

2.1 Valori di C assunti da Launder e Spalding 13
2.2 Valori dei numeri di Prandtl-Schmidt σ_ϕ 13

3.1 Condizioni al contorno raccomandate a seconda della tipologia di simulazione 31

Capitolo 1

Il software FLACS

Il codice di calcolo FLACS (*FLame ACceleration Simulator*) è un programma per la modellazione, in dominio tridimensionale, delle conseguenze dovute a fenomeni di dispersione e/o esplosione (si vedano rispettivamente la Figura 1.1 e la Figura 1.2 per degli esempi) per tutti gli scenari di rilascio di materiale infiammabile o tossico.

Oggigiorno tale software ha già trovato estensiva applicazione in svariati campi, specialmente in un ambito industriale dove sia previsto nei processi produttivi l'impiego di gas e petrolio, ma anche in centrali nucleari e strutture potenzialmente a rischio di esplosioni di polveri.

La modellazione in un contesto totalmente 3D permette di prevedere molto più accuratamente le conseguenze dei suddetti fenomeni, includendo inoltre effetti di contribuzione e mitigazione come, per esempio, il confinamento e la congestione dovuto alla definizione della reale geometria del problema, la ventilazione ed eventuali sistemi a diluvio (*water deluge systems*).

Una profonda comprensione ed una maggiore precisione dei risultati non solo contribuisce ad aumentare il reale livello di sicurezza, ma permette anche ai progettisti di scegliere misure progettuali e di mitigazione più efficaci, incrementando la sicurezza stessa da un lato e migliorando il rapporto tra efficacia e costo dell'intervento.

Tra le principali funzioni di FLACS si annoverano:

- Capacità di modellare in maniera integrata esplosioni e dispersioni;
- Modellazione delle conseguenze in totale 3D;
- Importazione di geometria in formato .dwg da AutoCAD o in formato .dgn da Microstation, PDMS, PDS e AutoReagas;
- Possibilità di modificare manualmente la geometria con efficacia;
- Modellazione bifasica (liquidi infiammati);

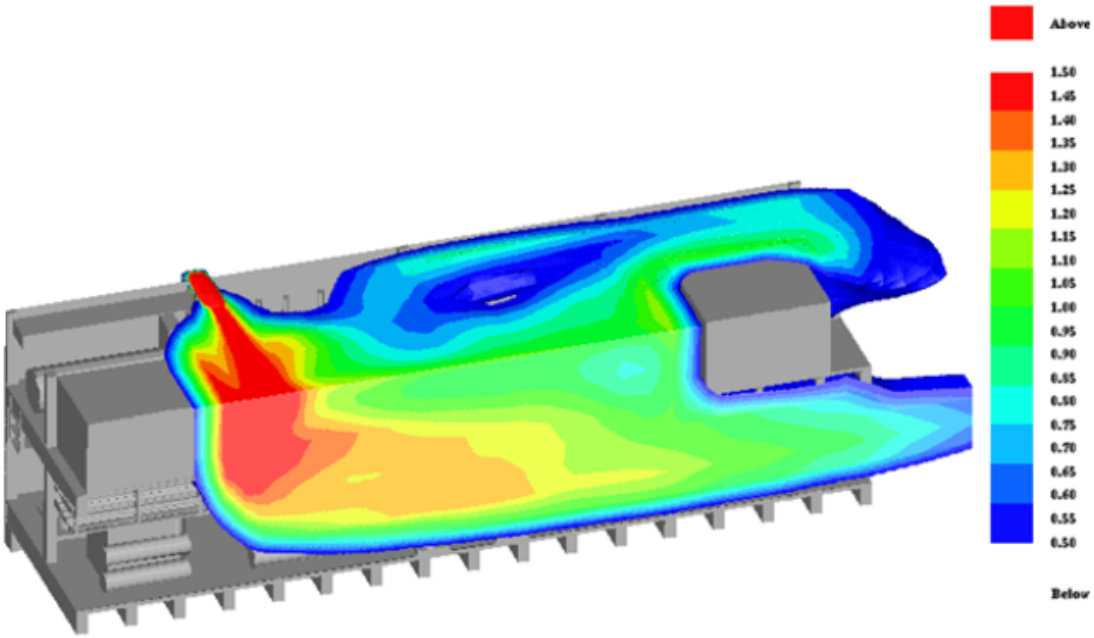


Figura 1.1: Dispersione di gas in edificio ventilato : volume di gas infiammabile

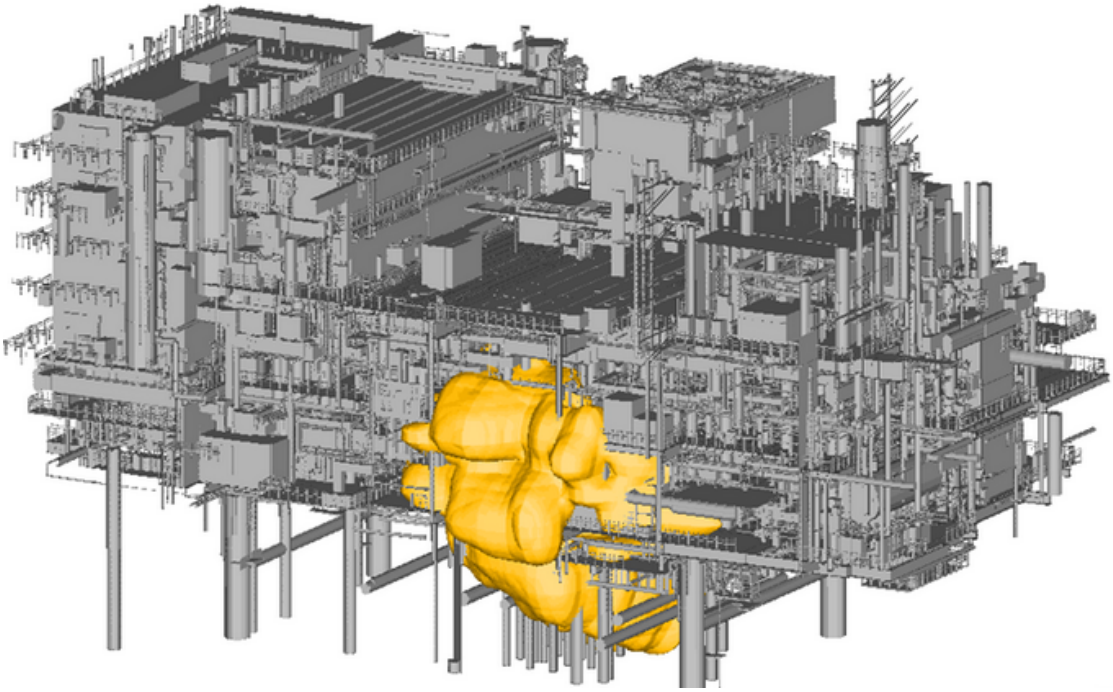


Figura 1.2: Esplosione in piattaforma *off-shore*

- Possibilità di inserire nel modello miscele di gas;
- Modellazione in moto transitorio (dipendente dal tempo);
- Possibilità di inserire nel modello gli effetti di misure di prevenzione e mitigazione;
- Risultati attendibili ed ampiamente validati;
- Svariate opzioni di visualizzazione dei risultati (2D, 3D, animazioni, output in file di testo);
- Migliore comprensione dei fenomeni e dei risultati;
- Disponibilità di linee guida esaurienti per l'utente, grazie ad un'ampia validazione basata su esperimenti effettuati.

In particolare, la versione utilizzata (v. 10.4.r2) è una *release* minore che risolve alcuni bug e apporta miglioramenti soprattutto per quel che riguarda l'importazione di geometrie da programmi esterni ed il calcolo delle "porosità" mediante l'*utility* PorCalc per la determinazione del congestionamento in un ambiente.

FLACS, inoltre, viene ampiamente utilizzato per le seguenti applicazioni:

- Studio di esplosioni *off-shore*, sia con approccio deterministico sia probabilistico;
- Valutazione del rischio in edifici *on-shore* (per esempio, sale di controllo o strutture temporanee);
- Ottimizzazione del rilevamento di gas;
- Calcolo della dispersione di materiale tossico;
- Esplosioni di polveri (con il modulo DustEx di FLACS);
- Investigazione su incidenti (FLACS è stato usato per indagini su molte esplosioni, tra cui quelle della piattaforma petrolifera Piper Alpha (Mare del Nord, 1988), del deposito di petrolio di Buncefield (Inghilterra, 2005) e della piattaforma di perforazione Deepwater Horizon (2010)).

Capitolo 2

Modellistica alla base del software

La procedura di calcolo di FLACS è basata sull'impiego di un codice CFD 3D che risolve le equazioni di Navier-Stokes mediate per massa, quantità di moto, entalpia, energia cinetica turbolenta, tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta, frazione di massa di combustibile e frazione di miscela su di una griglia cartesiana strutturata mediante un metodo ai volumi finiti. Tali equazioni, spesso definite RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) sebbene la media sia di Favre, vengono affiancate dall'equazione di stato dei gas ideali e dal modello $k-\varepsilon$ per la turbolenza per chiudere il problema, con a completamento dei modelli sotto-griglia (*sub-grid models*) che considerano l'influenza di oggetti non risolvibili sulla griglia computazionale, ossia di dimensioni minori della singola maglia. La griglia risolutiva è di due tipologie: griglia sfalsata (*staggered grid*) per le componenti del vettore velocità; griglia in cui le variabili sono associate al baricentro della cella (*cell-centered grid*) per le variabili scalari come densità, pressione e temperatura. FLACS utilizza lo schema numerico SIMPLER (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Revised*), proposto da Patankar nel 1980, esteso con l'inserimento nell'equazione dell'entalpia per fluidi comprimibili di termini sorgente per il lavoro di compressione, e lo schema semplificato SIMPLEC (*SIMPLE-Consistent*), proposto da Doormall e Raithby nel 1984, per i fluidi incomprimibili.

2.1 Modello matematico

Problemi fisici che coinvolgono il flusso dei fluidi ed il trasferimento di massa e di calore sono governati dai principi di conservazione della massa, della quantità di moto, dell'energia, delle specie chimiche, etc.... I suddetti principi sono matematicamente espressi mediante equazioni differenziali alle derivate parziali la cui forma generalizzata è quella della cosiddetta *equazione della convezione-diffusione*:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)}_{\substack{\text{termine non}\\ \text{stazionario}}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\phi)}_{\text{termini convettivi}} =$$
$$= \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z}\right)}_{\text{termini diffusivi}} + \underbrace{S_\phi}_{\substack{\text{termine}\\ \text{sorgente}}}, \tag{2.1}$$

dove ϕ è la grandezza scalare trasferita dal fluido in movimento con velocità $\vec{u} \equiv (u, v, w)$, densità ρ e coefficiente di diffusione Γ. La variabile dipendente ϕ può avere il significato di componente della velocità, di energia cinetica turbolenta, di entalpia, di frazione di massa di una specie chimica, etc .... I termini presenti nell'equazione differenziale generale (2.1) vengono brevemente descritti di seguito:

TERMINE NON STAZIONARIO Tiene conto delle variazioni nel tempo di ϕ per una data posizione nello spazio;

TERMINI CONVETTIVI Non alterano il bilancio di ϕ ma agiscono solo sul suo trasferimento nello spazio;

TERMINI DIFFUSIVI Tengono conto di meccanismi di carattere molecolare, presenti unicamente in sistemi a più specie quando a diffondere è una singola specie sotto gradienti non nulli di concentrazione;

TERMINE SORGENTE Rappresenta il tasso di generazione (o di distruzione) di ϕ nell'unità di volume: in particolare, $S_\phi = 0$ nel caso di produzione di massa nulla; viceversa $S_\phi \neq 0$ nel caso di sistemi a più componenti in cui si prevede la possibilità di reazioni chimiche con prodotti non necessariamente nulli.

Le equazioni della quantità di moto (2.3) sono un caso particolare in quanto il termine in cui compare la pressione non viene inserito all'interno del termine sorgente, poichè la pressione è una variabile dipendente così come la velocità.

Generalmente, la variabile ϕ è funzione delle tre coordinate spaziali cartesiane e di una temporale. Per quel che riguarda la coordinata temporale, la dipendenza è del tipo *one-way*, ossia il valore assunto in un determinato istante è funzione unicamente dei valori assunti negli istanti precedenti e non dei valori che ϕ assumerà negli istanti successivi. Le coordinate spaziali, invece, possono essere del tipo one-way o *two-way*, caso in cui le condizioni in una data posizione sono influenzate dalle variazioni delle condizioni su entrambi i lati della posizione.

Per esprimere gli operatori differenziali che compariranno nelle equazioni, d'ora in poi si adotterà la convenzione di Einstein nelle sommatorie, la quale prevede la seguente notazione:

1. Divergenza:
$$\nabla \cdot (\bullet) = \partial(\bullet)_j / \partial x_j$$
2. Gradiente:
$$\nabla(\bullet) = \partial(\bullet)/\partial x_j$$

2.2 Equazioni dei gas comprimibili

Il codice FLACS risolve le equazioni differenziali alle derivate parziali della gasdinamica per una serie di volumi di controllo, includendo gli effetti di turbolenza e reazioni chimiche all'interno di esse. Tali equazioni vengono discretizzate per mezzo di una tecnica ai volumi finiti e risolte adottando schemi numerici che verranno affrontati in maggior dettaglio nel paragrafo 2.4 a pagina 18.

In particolare, le equazioni che governano il moto dei gas comprimibili nel modello matematico adottato da FLACS (si veda il capitolo 2 a pagina 7) sono riportate di seguito:

- Conservazione della massa (sistema di riferimento euleriano):
$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\beta_v \rho)}_{\substack{\text{termine non}\\ \text{stazionario}}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_j \rho u_j)}_{\substack{\text{termine}\\ \text{convettivo}}} = \underbrace{\frac{\dot{m}}{V}}_{\substack{\text{termine}\\ \text{sorgente}}}, \tag{2.2}$$
  dove:
  - β_v porosità volumetrica [–];
  - β_j porosità superficiale (nella j-esima direzione) [–];
  - ρ densità del gas [kg m^{-3}];
  - u_j velocità media (componente nella j-esima direzione) [m s^{-1}];
  - $\dot{m}$ portata di massa [kg s^{-1}];
  - V volume [m^{-3}].
- Conservazione della quantità di moto:
$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\beta_v \rho u_i)}_{\substack{\text{termine non}\\ \text{stazionario}}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_j \rho u_i u_j)}_{\substack{\text{termine}\\ \text{convettivo}}} = \underbrace{-\beta_v \frac{\partial p}{\partial x_i}}_{\substack{\text{sforzi di}\\ \text{pressione}}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_j \sigma_{ij})}_{\text{sforzi nel fluido}} + \underbrace{F_{o,i} + F_{w,i}}_{\text{sforzi viscosi}} + \underbrace{\beta_v(\rho - \rho_0) g_i}_{\text{sforzi inerziali}}, \tag{2.3}$$
  dove:

- p pressione assoluta [Pa];
- ρ_0 densità dell'ambiente [kg m^{-3}];
- g_i accelerazione di gravità (componente nella i-esima direzione) [m s^{-2}];
- σ_{ij} tensore delle tensioni [Pa].

I termini $F_{w,i}$ e $F_{o,i}$ sono di natura attritiva e rappresentano la resistenza al flusso dovuta alle forze viscose che si instaurano a causa, rispettivamente, delle pareti e delle ostruzioni dovute agli oggetti *sub-grid*:

$$F_{w,i} = -\beta_v \tau_{w,i} \frac{A_w}{V}, \tag{2.4a}$$

$$F_{o,i} = -\rho \left| \frac{\partial \beta}{\partial x_i} \right| u_i |u_i|, \tag{2.4b}$$

con $\tau_{w,i}$ tensioni tangenziali nella direzione i-esima e A_w superficie della parete.

- Equazione di trasporto dell'entalpia:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\beta_v \rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_j \rho u_j h) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\beta_j \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial x_j}\right) + \beta_v \frac{Dp}{Dt} + \frac{\dot{Q}}{V}, \tag{2.5}$$

dove:

  - h entalpia specifica [J kg^{-1}];
  - μ_{eff} viscosità efficace [Pa $\cdot$ s];
  - $\dot{Q}$ flusso di calore [J s^{-1}].

- Equazione di trasporto della frazione di massa del combustibile:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\beta_v \rho Y_{\text{fuel}}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_j \rho u_j Y_{\text{fuel}}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\beta_j \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\text{fuel}}} \frac{\partial Y_{\text{fuel}}}{\partial x_j}\right) + R_{\text{fuel}}, \tag{2.6}$$

dove:

  - Y_{fuel} frazione di massa del combustibile [–] (si veda l'equazione (2.25) al paragrafo 2.3.1.1);
  - R_{fuel} velocità di reazione del combustibile [kg m^{-3} s^{-1}] (si veda l'equazione (2.33) al paragrafo 2.3.1.2).

- Equazione di trasporto della frazione di miscelamento del combustibile:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\beta_v \rho \xi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_j \rho u_j \xi) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\beta_j \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\xi}\frac{\partial \xi}{\partial x_j}\right), \tag{2.7}$$

  La grandezza ξ descrive il grado di miscelamento tra due stati ben definiti 0 e 1 di una generica variabile ϕ:

$$\xi = \frac{\phi - \phi^0}{\phi^1 - \phi^0} \tag{2.8}$$

- Equazione di trasporto dell'energia cinetica turbolenta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\beta_v \rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_j \rho u_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\beta_j \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}\right) + \beta_v P_k - \beta_v \rho \varepsilon, \tag{2.9}$$

  dove:

  - k energia cinetica turbolenta (per unità di massa) [m^2 s^{-2}], si veda l'equazione (3.2);
  - ε dissipazione di energia cinetica turbolenta (per unità di massa) [m^2 s^{-3}], si veda l'equazione (3.3);
  - P_k produzione di energia cinetica turbolenta [Pa].

- Equazione di trasporto del tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\beta_v \rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\beta_j \rho u_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\beta_j \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right) + \beta_v P_\varepsilon - C_{2\varepsilon}\beta_v \rho \frac{\varepsilon^2}{k}, \tag{2.10}$$

  dove:

  - P_ε produzione di dissipazione di energia cinetica turbolenta [Pa].

Il tensore delle tensioni σ_{ij}, presente nell'equazione (2.3), è dato da:

$$\sigma_{ij} = \mu_{\text{eff}}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\delta_{ij}\left(\rho k + \mu_{\text{eff}}\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right), \tag{2.11}$$

dove δ_{ij} è il delta di Kronecker, ossia una funzione che assume valore 1 se $i = j$ ed assume valore 0 se $i \neq j$.

La viscosità efficace μ_{eff}, presente nelle equazioni (2.5), (2.6), (2.7), (2.9), (2.10), (2.11) all'interno dei termini diffusivi (descritti nel paragrafo 2.1) si esprime come somma di viscosità dinamica e viscosità turbolenta (o vorticosa):

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_T = \mu + \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \tag{2.12}$$

La produzione di energia cinetica turbolenta P_k è definita come somma dei seguenti contributi:

$$P_k = G_s + G_w + G_b + G_o \tag{2.13}$$

Il contributo legato alle tensioni tangenziali nel fluido G_s si ottiene derivando l'equazione di bilancio della quantità di moto:

$$G_s = \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tag{2.14}$$

La produzione di energia cinetica turbolenta dovuta agli sforzi tangenziali alle pareti G_w dipende dalla geometria e dal materiale delle stesse.

Il contributo dovuto alla spinta di galleggiamento G_b è descritto dalla seguente espressione:

$$G_b = -\frac{1}{\rho} \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_b} g_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \tag{2.15}$$

La generazione di turbolenza dovuta alle ostruzioni sotto-griglia è data da:

$$G_o = C_o \beta_v \rho |\vec{u}| u_i^2 f_i, \tag{2.16}$$

dove C_o è una costante del modello ed f_i è un parametro dipendente dagli oggetti sotto-griglia.

La produzione di dissipazione di energia cinetica turbolenta P_ε è definita come somma dei seguenti contributi:

$$P_\varepsilon = C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k (1 + C_{3\varepsilon} R_f), \tag{2.17}$$

dove il modello che tiene conto del galleggiamento segue:

$$R_f = -\frac{G_b}{P_k} \frac{|\vec{u} \times \vec{g}|}{|\vec{u}||\vec{g}|} \tag{2.18}$$

In FLACS, i termini G_b ed R_f risultano nulli quando sono presenti prodotti chimici.

Le costanti σ_ϕ e $C_{i\varepsilon}$ che compaiono nelle equazioni soprastanti sono descritte nel paragrafo 2.2.1 nella pagina seguente.

Tabella 2.1: Valori di C assunti da Launder e Spalding

C_μ	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	$C_{3\varepsilon}$
0.09	1.44	1.92	0.80

Tabella 2.2: Valori dei numeri di Prandtl-Schmidt σ_ϕ

σ_h	σ_{fuel}	σ_ξ	σ_k	σ_ε	σ_b
0.70	0.70	0.70	1.00	1.30	0.90

2.2.1 Turbolenza

L'effetto della turbolenza viene incluso attraverso il concetto di viscosità turbolenta (o vorticosa) μ_T introdotto dal modello $k-\varepsilon$, il quale prevede la risoluzione di due equazioni di trasporto aggiuntive: una per l'energia cinetica turbolenta (2.9) ed una per il tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta (2.10). Il software adotta l'ipotesi di Boussinesq sulla modellazione dei termini $u_i'u_j'$, i quali vengono interpretati come sforzi aggiuntivi (detti sforzi di Reynolds) che sottraggono energia al campo medio per trasferirla alle fluttuazioni. Identificando queste fluttuazioni come la componente turbolenta del moto, si potrà porre per la parte deviatorica degli sforzi di Reynolds:

$$-\rho < u_i'u_j' >= \mu_{\text{eff}}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\rho k\delta_{ij}, \tag{2.19}$$

dove con $< \bullet >$ si intende l'operatore lineare di media d'insieme.

FLACS, inoltre, per la risoluzione delle equazioni di cui al paragrafo 2.2, per la serie di costanti C assume i valori in Tabella 2.1 in accordo con il modello di Launder e Spalding (1974). Per quanto riguarda i numeri turbolenti di Prandtl-Schmidt σ_ϕ, i quali confrontano la diffusione della variabile ϕ con la viscosità dinamica, il software assume i valori in Tabella 2.2.

2.3 Modello fisico-chimico

Se da una parte la combustione in fase premiscelata in condizioni isobare ed isocore è un processo piuttosto lineare da descrivere, le esplosioni di gas in ambienti industriali, al contrario, sono fenomeni complessi. L'elemento chiave da modellare è costituito dal ciclo retroattivo (*feedback loop*) che si instaura tra il flusso generato dall'espansione del gas e la velocità di combustione turbolenta, il quale comporta

come conseguenze l'accelerazione della fiamma, la graduale crescita della pressione e la formazione di onde d'urto.

I modelli di combustione implementati nei codici CFD per la simulazione di esplosioni per applicazioni industriali si fondano solitamente sull'assunzione che la combustione sia in fase premiscelata e che le reazioni chimiche siano rapide. FLACS modella la combustione mediante l'ausilio di un modello di fiamma sviluppato *ad hoc* (si veda il paragrafo 2.3.1.2) ed un sotto-modello per la velocità di combustione (si veda il paragrafo 2.3.1.3) come funzione della miscela di gas, della temperatura, della pressione e della turbolenza nel reagente consumato durante la reazione chimica. Miscele infiammabili contenenti combustibili gassosi come propano o etilene, pertanto, reagiscono con molta più violenza rispetto a miscele aria-metano. Lo sviluppo dei modelli di combustione, così come dei modelli di turbolenza, costituisce attualmente il catalizzatore delle risorse investite dalla GexCon nel software FLACS. Il fine dichiarato è quello di ottenere modelli che, seppur applicati su una griglia computazionale relativamente grossolana, siano ancora in grado di adeguatamente rappresentare i meccanismi dominanti nella propagazione dei gas e del loro fronte di fiamma.

2.3.1 Combustione

L'innesco di una nube premiscelata di combustibile ed ossidante può dar luogo ad un'esplosione. Nella fase antecedente l'esplosione, la miscela si trova in condizione stazionaria non turbolenta e brucia con velocità di combustione laminare la quale è funzione della tipologia di combustibile e del rapporto di equivalenza Φ:

$$S_L^0 = S_L^0(\text{combustibile}, \Phi)$$

Il rapporto di equivalenza è definito come:

$$\Phi = \frac{(F/O)}{(F/O)_{stech}}, \tag{2.20}$$

dove F è il combustibile ed O l'ossidante. Tale parametro, pertanto, fornisce un'indicazione sul quantitativo di combustibile presente all'interno di una miscela:

- $\Phi > 1 \longrightarrow$ miscela ricca di combustibile;
- $\Phi = 1 \longrightarrow$ miscela stechiometrica;
- $\Phi < 1 \longrightarrow$ miscela povera di combustibile.

Per miscele caratterizzate da un contenuto di combustibile al di sotto del limite inferiore di infiammabilità o al di sopra del limite superiore di infiammabilità, la

velocità laminare di combustione è pari a zero, ossia la miscela non brucia. Durante l'esplosione vera e propria, la fiamma subisce un'accelerazione e acquisisce una connotazione turbolenta. La velocità di combustione turbolenta è molto maggiore rispetto alla laminare come conseguenza di un maggior grado di mescolamento tra reagenti e prodotti della combustione. Da un punto di vista operativo, FLACS utilizza correlazioni empiriche derivanti da lavori sperimentali per entrambe le velocità di combustione.

Nelle applicazioni industriali, la zona di reazione del fronte di fiamma di un gas premiscelato è sottile se paragonata alle dimensioni pratiche della *mesh* di calcolo. Da qui deriva la necessità di modellare la fiamma, obiettivo che il software persegue impiegando il cosiddetto "modello-β". Tale modello prevede un inspessimento del fronte di fiamma ottenuto per mezzo di un aumento fittizio della diffusione di una quantità pari a β e, parallelamente, una diminuzione della velocità di reazione di una quantità pari ad $1/\beta$.

2.3.1.1 Reazione stechiometrica

Il processo di combustione consiste nell'ossidazione di un combustibile accompagnata dalla produzione di calore e luce. Una semplice reazione stechiometrica, al cui termine non rimangono nè combustibile nè ossidante, può esser scritta come segue:

$$C_{nc}H_{nh}O_{no} + a(O_2) \rightarrow nc(CO_2) + b(H_2O) + Q \tag{2.21}$$

Nella reazione soprastante i prodotti della combustione sono il vapore acqueo e l'anidride carbonica mentre l'ossidante, come nella maggior parte dei processi di combustione, è costituito dall'aria. Il quantitativo stechiometrico di ossidante su base molare può esser calcolato nel modo seguente:

$$a = nc + \frac{nh}{4} - \frac{no}{2} \tag{2.22}$$

Si riportano qui sotto alcune relazioni valide per miscele aria-combustibile:

- Rapporto stechiometrico di massa ossidante-combustibile:

$$r_{ox} = a\frac{M_{O_2}}{M_{\text{fuel}}} \tag{2.23}$$

- Rapporto stechiometrico di massa aria-combustibile:

$$r_{air} = \left(1 + \frac{Y_{N_2}}{Y_{O_2}} r_{ox}\right) \simeq 4.31 r_{ox} \tag{2.24}$$

- Frazione di massa del combustibile, noto il rapporto di equivalenza Φ:

$$Y_{\text{fuel}} = \frac{\Phi}{\Phi + r_{air}} \tag{2.25}$$

2.3.1.2 Il FLACS *Flame Model*

Il coefficiente di diffusione per il combustibile, che si misura in [m^2s^{-1}], deriva dall'equazione (2.6) e dipende dalla viscosità efficace:

$$D = \frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_{\text{fuel}}} \tag{2.26}$$

Il modello di fronte di fiamma adottato dal software adimensionalizza il coefficiente di diffusione e la velocità di reazione W per mezzo di un fattore β (descritto nel paragrafo 2.3.1):

$$D^* = D\beta \qquad W^* = \frac{W}{\beta} \tag{2.27}$$

Il coefficiente β alla base del modello è esprimibile mediante la seguente espressione:

$$\beta = \frac{\Delta_g}{l_{LT}}, \tag{2.28}$$

dove Δ_g è la lunghezza del volume di controllo ed l_{LT} è la lunghezza di mescolamento, la quale dipende dall'energia cinetica turbolenta e dalla sua dissipazione:

$$l_{LT} = C_\mu k^{3/2} \varepsilon^{-1} \tag{2.29}$$

Da un'analisi agli autovalori della velocità di combustione svolta da Arntzen (1998) è stata ottenuta la seguente relazione numerica per $\chi_q = 0.05$:

$$WD = 1.37 S_u^2 = W^* D^* \tag{2.30}$$

dove:

- χ_q limite di esaurimento della variabile di progressione χ;
- S_u velocità di combustione [m s^{-1}].

La variabile di progressione χ fornisce un'informazione sulla quantità di combustibile bruciato dal gas nei due stati 0 e 1:

$$\chi = \frac{Y_{\text{fuel}}}{Y^0_{\text{fuel}} + \xi(Y^1_{\text{fuel}} - Y^0_{\text{fuel}})} \tag{2.31}$$

La dipendenza delle variabili adimensionalizzate D^* e W^* dalle dimensioni della griglia e dalla velocità di bruciamento può evincersi dalle relazioni che seguono:

$$W^* = c_{1\beta}\frac{S_u}{\Delta_g} \qquad D^* = c_{2\beta}S_u\Delta_g, \tag{2.32}$$

dove $c_{1\beta}$ e $c_{2\beta}$ sono due costanti del modello.

La velocità di reazione del combustibile è modellata mediante la seguente espressione:

$$R_{\text{fuel}} = -W^*\rho\min(\delta_H(\chi-\chi_q);\chi;9-9\chi), \tag{2.33}$$

dove δ_H è la funzione "gradino" di Heaviside.

2.3.1.3 Velocità di combustione

Quando una nube di combustibile viene innescata con una sorgente di debole ignizione a a partire da condizioni di quiete, l'iniziale processo di combustione è definito *laminare*. Il fronte di fiamma appare liscio e la propagazione della fiamma è interamente governata da processi di diffusione molecolare e/o termica. Poco dopo, le instabilità che si generano a causa di diverse ragioni (per esempio l'innesco, la dinamica del flusso, l'instabilità di Rayleigh-Taylor) comporta un frastagliamento della superficie della fiamma: la velocità di fiamma aumenta e diventa dunque *quasi-laminare*. Dopo un periodo di transizione, dipendente dalle condizioni del fluido, la fiamma infine raggiunge un regime di combustione turbolenta.

La velocità di combustione laminare è funzione della tipologia di combustibile, della miscela combustibile-aria e della pressione. Nel caso di una miscela di combustibili la velocità di combustione laminare viene stimata mediante una media pesata sul volume. La dipendenza della velocità di combustione laminare dalla pressione viene descritta come:

$$S_L = S_L^0\left(\frac{p}{p_0}\right)^{\gamma_p}, \tag{2.34}$$

dove γ_p è un parametro che dipende dal combustibile.

In regime quasi-laminare la velocità di combustione turbolenta è fornita da:

$$S_{QL} = S_L\left(1+\chi\min\left(\left(\frac{R}{3}\right)^{0.5};1\right)\right), \tag{2.35}$$

dove:

- R raggio della fiamma [m];
- χ costante dipendente dal combustibile.

La correlazione empirica per calcolare la velocità di combustione turbolenta S_T è una semplificazione dell'espressione generale presentata da:

$$S_T/S_L = 0.875K^{-0.392}\frac{u'}{S_L}, \tag{2.36}$$

in cui il fattore di allungamento (*stretch factor*) di Karlowitz è rimpiazzato da:

$$K = 0.157\frac{u'}{S_L}^{2} R_T^{-0.5}, \tag{2.37}$$

dove R_T è il numero di Reynolds per moto turbolento. In definitiva, l'espressione finale della velocità di combustione turbolenta è la seguente, assumendo μ costante:

$$S_T = 1.81u'^{0.412}l_I^{0.196}S_L^{0.784}\mu^{-0.196}. \tag{2.38}$$

FLACS, infine, seleziona la velocità di combustione come il valore massimo tra la velocità in regime quasi-laminare e la velocità in regime turbolento: $S_u = \max(S_{QL}; S_T)$.

2.4 Schemi numerici

Come ampiamente descritto al capitolo 2 a pagina 7, FLACS è un codice CFD che risolve le equazioni dei fluidi comprimibili (si veda il paragrafo 2.1) su di una griglia cartesiana 3D per mezzo di un metodo ai volumi finiti. Le equazioni di conservazione, la cui forma generale è quella dell'equazione (2.1), sono poi chiuse dalla legge dei gas ideali $pV = nRT$, dove:

- n numero di moli [–];
- $R = R_u/M$: costante specifica del gas [J kg^{-1} K^{-1}];
- $R_u = 8.314$: costante universale dei gas [J mol^{-1} K^{-1}];
- M massa molare del gas [kg mol^{-1}].

Il modello numerico si basa su di uno schema del secondo ordine per la risoluzione spaziale dei flussi diffusivi e su di uno schema κ del secondo ordine (ossia uno schema ibrido pesato tra differenza *upwind* e differenza centrata del secondo ordine) per la risoluzione spaziale dei flussi convettivi. Lo schema di risoluzione temporale impiegato da FLACS, al contrario, è uno schema di Eulero del primo ordine con differenza all'indietro. In quest'ultimo caso, la motivazione dietro l'utilizzo di uno schema del primo ordine risiede nel fatto che uno schema del secondo

ordine richiederebbe intervalli di tempo eccessivamente ridotti e dunque un maggiore onere computazionale. A tal proposito, sono state stabilite delle linee guida per la determinazione del passo temporale basate sui numeri di Courant-Friedrich-Levy relativi alla velocità del suono (CFLC) ed alla velocità del flusso (CFLV). Il valore del CFLC lega, durante la simulazione, l'intervallo di tempo Δt alla dimensione del volume di controllo della *mesh* mediante la velocità di propagazione del segnale nella seguente maniera: ogni Δt viene scelto in modo che le onde sonore si propaghino per una lunghezza limitata, pari alla lunghezza media del volume di controllo moltiplicata per il valore del CFLC. Tale criterio di limitazione dell'intervallo temporale è solitamente predominante nelle fasi iniziali di un'esplosione, quando la velocità del flusso e la velocità di combustione sono ancora contenute. Nel caso del CFLV, invece, l'intervallo di tempo Δt viene scelto in modo che il fluido si propaghi per una lunghezza limitata, pari alla lunghezza media del volume di controllo moltiplicata per il numero di Courant (che nel caso monodimensionale è pari ad $u\Delta t/\Delta x$). Tale criterio di limitazione dell'intervallo temporale è usualmente preponderante nelle fasi finali di un'esplosione, quando la velocità del flusso e la velocità di combustione assumono valori piuttosto elevati.

Nelle simulazioni di esplosioni di gas, per ottenere buoni risultati vanno applicati i valori CFLC = 5 e CFLV = 0.5, il che sta a significare che la pressione può propagarsi per 5 celle e il flusso per metà cella ad ogni step temporale. Per le simulazioni di dispersione, le raccomandazioni sono meno restrittive in quanto il risultato non è particolarmente influenzato dalla dimensione dell'intervallo temporale: di solito i valori del CFLC e del CFLV in questo caso sono amplificati di 4 volte rispetto al caso delle esplosioni.

Inoltre, il software implementa l'algoritmo di correzione della pressione SIMPLE esteso ai fluidi comprimibili mediante l'aggiunta di termini sorgente che tengano conto del lavoro di compressione nell'equazione di bilancio dell'entalpia (2.5). Le iterazioni di calcolo vengono ripetute finchè non viene ottenuto un residuo di massa minore di 10^{-4}.

Capitolo 3

Simulazione di un'esplosione semi-confinata

Nel presente capitolo viene delineato metodicamente l'iter generalizzato da seguire per realizzare una corretta simulazione di un'esplosione di gas in ambiente semi-confinato, con immagini provenienti dagli esempi di calcolo svolti durante il periodo di tirocinio.

Come già detto in precedenza, FLACS è uno strumento di fluidodinamica computazionale in grado di simulare esplosioni e dispersioni di gas. I dati di input da fornire ad un codice CFD necessari per il calcolo sono i seguenti:

- Una geometria, creata manualmente e specificamente per la simulazione, oppure importata da un sistema CAD;
- Una griglia che divide il dominio di calcolo in celle, all'interno delle quali una variabile (per esempio, la pressione) non varia nello spazio. FLACS utilizza una griglia cartesiana regolare il che comporta che le celle della griglia abbiano forma scatolare;
- Vari parametri inerenti lo scenario di simulazione, come le condizioni al contorno, la localizzazione dei punti di misura, la dimensione, posizione e composizione della nube di gas ed il punto di innesco.

Tutte le voci dell'elenco sono solitamente gestite nel pre-processore CASD (*Computer Aided Scenario Design*). La geometria viene salvata in un database, il quale è definito da un file con estensione .db contenuto in una cartella creata dall'interfaccia di CASD che, se richiamato dal pre-processore cliccando su *"Connect"*, consente di collegarsi ai progetti, alle geometrie ed agli oggetti definiti al suo interno (Figura 3.1). La cartella del database non deve contenere file creati dall'utente o in generale file diversi da quelli generati in automatico da CASD.

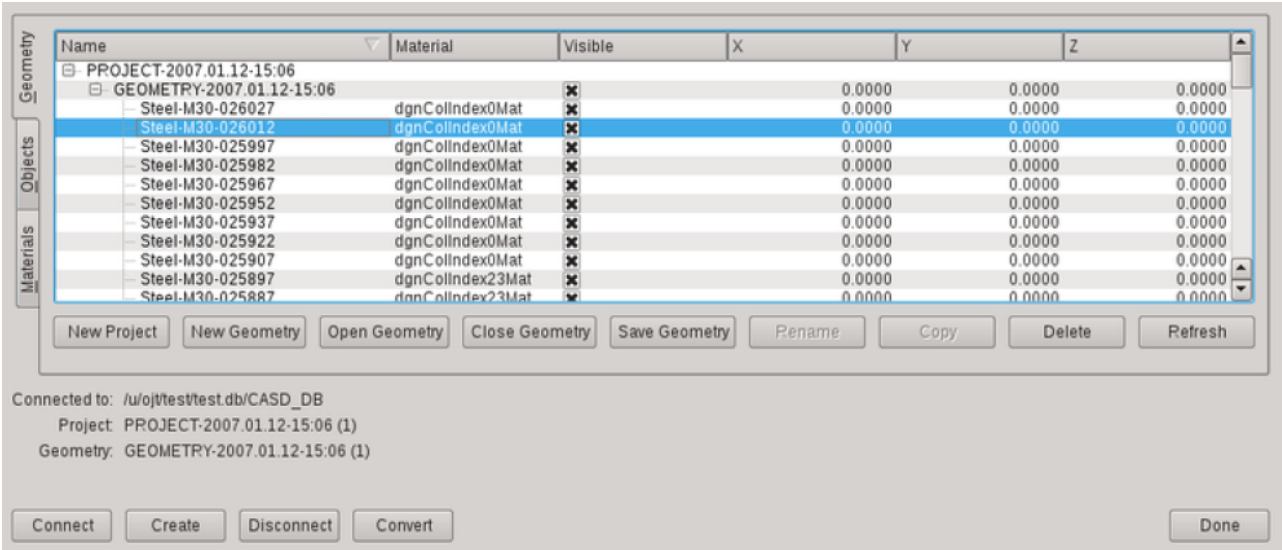


Figura 3.1: Finestra del database della geometria in CASD

In aggiunta al database, esiste una serie di altri file che vengono creati prima e durante la simulazione. Tutti i nomi dei file devono contenere il numero della simulazione (*job number*) che è formato da 6 cifre. In generale, la simulazione numero 010101 necessita dei seguenti file come input:

cg010101.dat3 file della griglia;

cs010101.dat3 file dello scenario;

co010101.dat3 file della geometria, il quale contiene un'istantanea della geometria contenuta nel database;

cp010101.dat3 file delle porosità, creato da Porcalc (si veda il paragrafo **??** a pagina ??).

Durante la simulazione vengono generati ulteriori file:

r1010101.dat3 output variabile scalare-tempo nei punti di misura fissati;

r3010101.dat3 output variabili di campo ai tempi desiderati, necessario per creare grafici 2D e 3D;

rt010101.dat3 file log della simulazione.

Oltre ai file summenzionati, sufficienti per il caso di un'esplosione, esiste un'altra serie di file di input/output che dipendono dalla tipologia di simulazione oggetto di studio, per i quali si rimanda al manuale del software.

3.1 Geometria

L'implementazione del modello geometrico in CASD rappresenta spesso l'operazione più dispendiosa in termini di tempo. Esistono due modi per definire la geometria:

1. Importazione da un modello CAD esistente;
2. Definizione all'interno del pre-processore CASD.

Nel primo caso si può sfruttare l'utility *geo2flacs*, nel secondo caso bisogna definire la geometria per mezzo del pre-processore. La struttura all'interno di un oggetto è basata su un modello detto *Constructive Solid Geometry* (CSG), il quale si fonda sull'idea di combinare semplici solidi primitivi (scatole e cilindri) mediante operatori Booleani (unioni e differenze).

Gli oggetti in CASD possono essere distinti in **locali** e **globali**: gli oggetti locali possono essere inclusi unicamente nella geometria in cui sono stati creati; gli oggetti globali possono essere impiegati in diverse geometrie estraendoli dal database. Pertanto, è in generale preferibile usare questi ultimi, creandoli dall'apposita scheda *"Objects"* presente nella finestra di dialogo di cui in Figura 3.1. Dal menu *"Geometry"* selezionando la voce *"Instance"* è poi possibile inserire, come blocchi non modificabili, gli oggetti globali creati nella posizione desiderata specificando le coordinate x-y-z del punto di inserimento.

A seconda del materiale, inoltre, è possibile differenziare gli oggetti mediante una gamma di colori *(hues)* individuati da un codice numerico.

3.2 Griglia computazionale

La griglia di calcolo costituisce la rappresentazione discreta del volume oggetto della simulazione. In FLACS, essa è composta da e cubiche o rettangolari definite da linee di griglia in direzione orizzontale o verticale, ossia un griglia cartesiana a singolo blocco. La Figura 3.3 mostra una sezione bidimensionale di una griglia uniforme, illustrando la posizione dei nodi interni e dei nodi sulla frontiera del dominio in relazione alle linee di griglia.

Dal menu *"Grid"* nella barra degli strumenti di CASD è possibile selezionare la voce *"Quick Grid"* (Figura 3.4), la quale permette la rapida creazione di una griglia costituita da un nucleo (*Core Domain*), solitamente coincidente con il filo esterno della geometria, e da una regione allungata (*Stretched Domain*), necessaria per ridurre l'onere computazionale al di fuori del volume principale. Realizzato il grigliato di base, si possono effettuare raffinamenti della griglia nelle zone di maggior interesse (in particolare dove ci si aspettano forti gradienti delle variabili

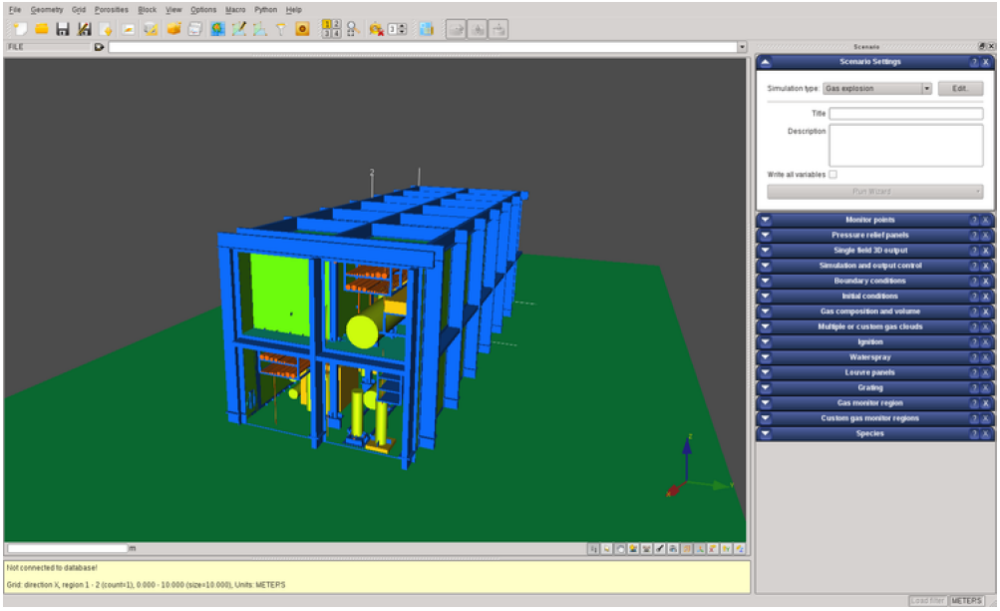


Figura 3.2: Geometria 3D in CASD

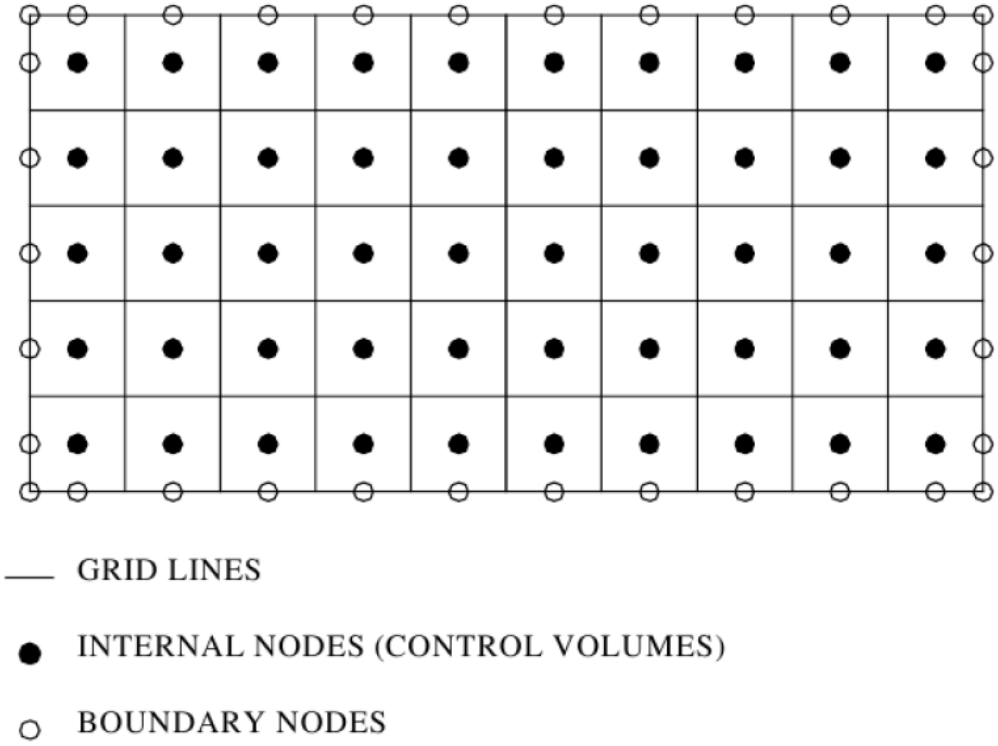


Figura 3.3: Sezione di una griglia che mostra i nodi interni ed al contorno

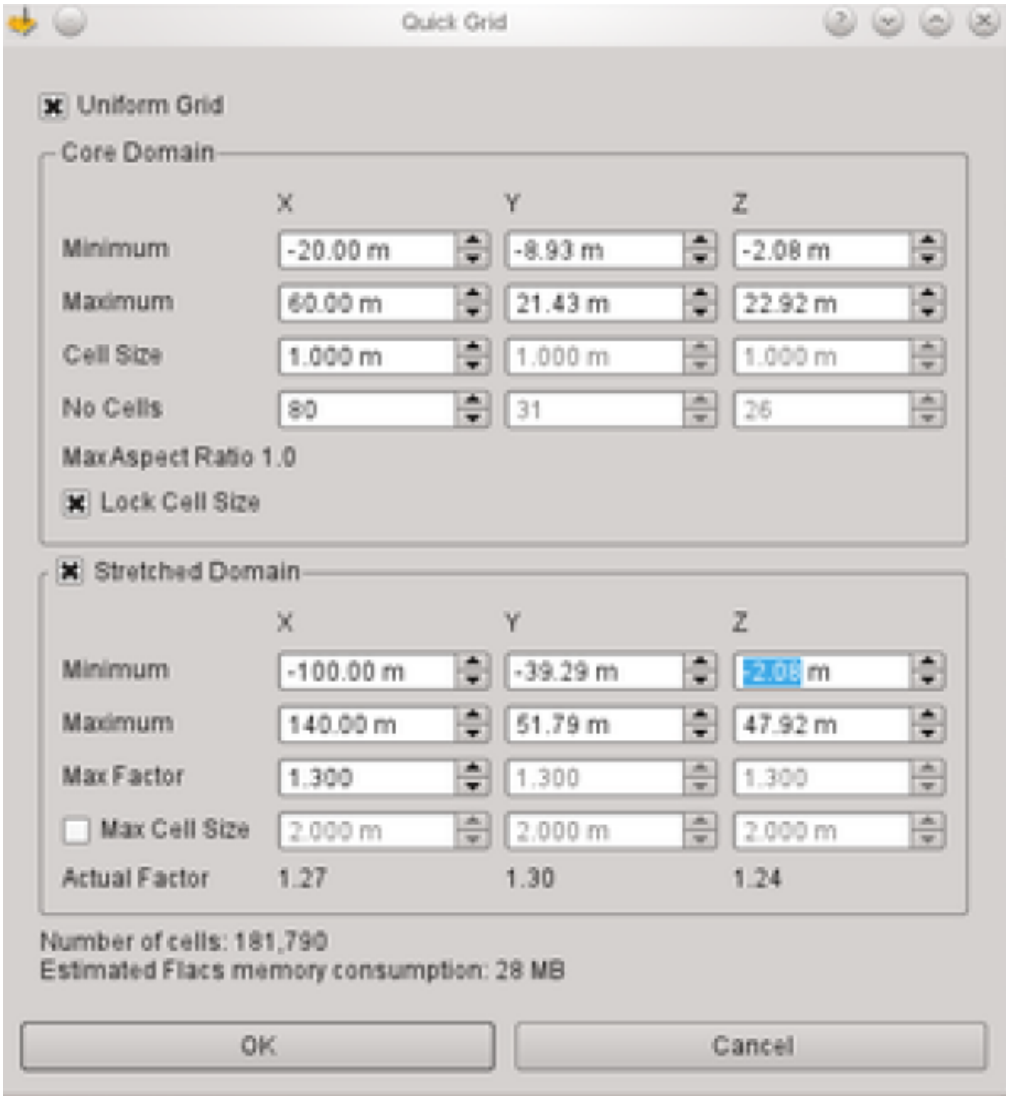


Figura 3.4: Strumento di creazione della griglia *(Quick Grid)*

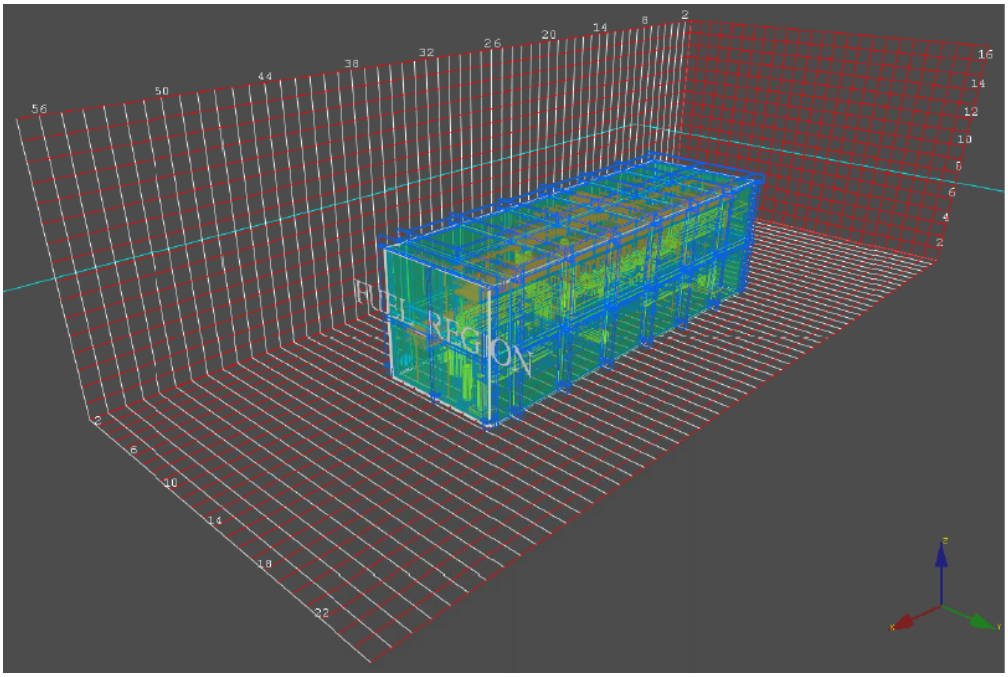


Figura 3.5: Griglia computazionale nelle 3 direzioni principali x-y-z

in gioco) aggiungendo localmente linee. Operativamente si fissa la *"Working Direction"*, poi si seleziona *"Add"* per aggiungere la linea di griglia alla coordinata desiderata. Si osservi che seppur sia possibile variare le dimensioni della griglia in ogni direzione, la maglia della griglia non è adattabile ad oggetti curvi o inclinati, i quali sono modellati come pareti scanalate a gradini per approssimarne la curvatura/inclinazione.

Tra le altre operazioni possibili sulle linee di griglia si annoverano la modifica della posizione, l'eliminazione, l'allungamento e la sostituzione in blocco delle linee selezionate con un nuovo set di linee. Per tenere traccia delle caratteristiche della griglia definita è presente il comando *"Information"* nel menu *"Grid"*.

3.2.1 Linee guida per la realizzazione della griglia

La risoluzione spaziale dovrebbe essere scelta in modo da ottenere per la simulazione dei risultati sufficientemente accurati in un intervallo di tempo accettabile. Per le simulazioni di esplosione, è possibile ottenere risultati ragionevolmente buoni su una griglia piuttosto rada entro un'ora nella maggior parte dei casi, e risultati più precisi in un tempo dell'ordine di ore. Perciò è raccomandabile effettuare dei test di sensitibilità dei risultati al variare della griglia, iniziando da una maglia grossolana per poi andare ad infittirla progressivamente laddove più opportuno. Inoltre,

bisogna tener conto della posizione della griglia anche durante la definizione della geometria, in particolare quando si definiscono oggetti di dimensioni maggiori di 1.5 volte le dimensioni di una singola cella di calcolo (come impalcati e muri), i quali devono essere allineati alla griglia onde evitare zone di efflusso indesiderate e/o aree di sfogo non corrette. Ciò è legato al fatto che il programma di calcolo delle porosità Porcalc (si veda il paragrafo 3.4 a pagina 35) sposta automaticamente i suddetti oggetti alla linea di griglia più vicina. Per quanto riguarda gli oggetti più piccoli, invece, non è necessario che siano allineati alla griglia (essendo di competenza dei modelli sotto-griglia), tranne nel caso in cui la geometria contenga un numero molto ridotto di oggetti.

Nel dettaglio di quel che concerne le simulazioni di esplosioni di gas, il dominio deve includere l'area in cui avviene l'esplosione oltre a tutti i bersagli rilevanti. All'interno della zona del dominio dove avviene la combustione e l'espansione dei suoi prodotti chimici è necessario impiegare una griglia a celle cubiche della stessa dimensione in tutte le direzioni, in quanto una griglia a maglie rettangolari annullerebbe il lavoro di validazione svolto dalla GexCon. Variazioni nelle dimensioni tra una cella e quella adiacente sono solitamente accettabili se dell'ordine del 10% nel *Core Domain* e fino al 20% nello *Stretched Domain*.

In caso di modellazione di esplosioni all'interno di un edificio, la nube di gas combustibile dev'essere risolta da almeno 15 celle. Le aree di sfogo devono essere risolte da almeno $6 - 8$ celle e dall'area di sfogo alla frontiera del dominio devono esserci almeno $5 - 10$ celle se l'esplosione all'esterno non è importante; viceversa, se quest'ultima è rilevante, la distanza dai contorni del dominio dovrebbe essere pari a $3 - 4$ volte la lunghezza dell'edificio.

3.3 Scenario

A questo punto bisogna andare a definire i parametri di input necessari alla caratterizzazione dello scenario di studio, i quali saranno raccolti nel file **cs010101.dat3**, il quale può essere consultabile e modificabile anche manualmente senza passare per l'interfaccia grafica del pre-processore.

Per definire uno scenario d'esplosione bisogna selezionare la voce *"Gas explosion"* nel menu a tendina *"Simulation type"* mostrato in Figura 3.6.

3.3.1 Punti di misura *(Monitor points)*

Il passo successivo consiste nel posizionare i cosiddetti *"Monitor Points"* (MPs), ossia i punti di misura nei quali si vogliono monitorare delle variabili scalari durante la simulazione (Figura 3.7). Per scegliere le variabili bisogna fare doppio-click sul MP considerato in modo che compaia l'elenco delle possibili variabili di out-

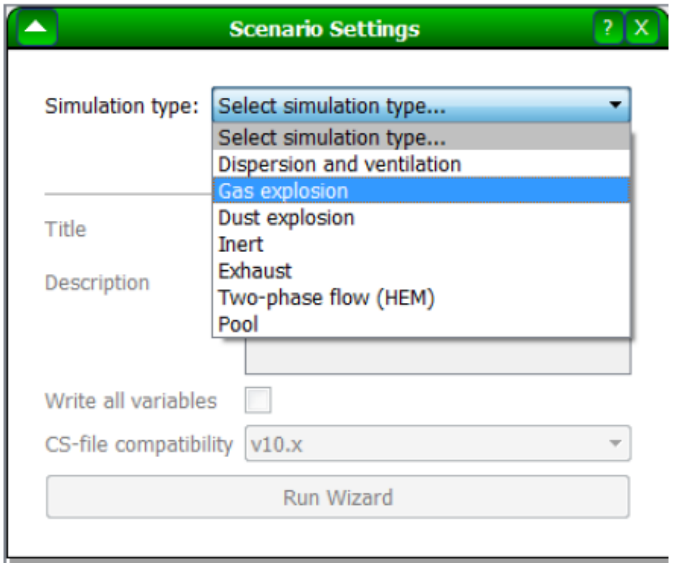


Figura 3.6: Scelta di uno scenario d'esplosione di gas

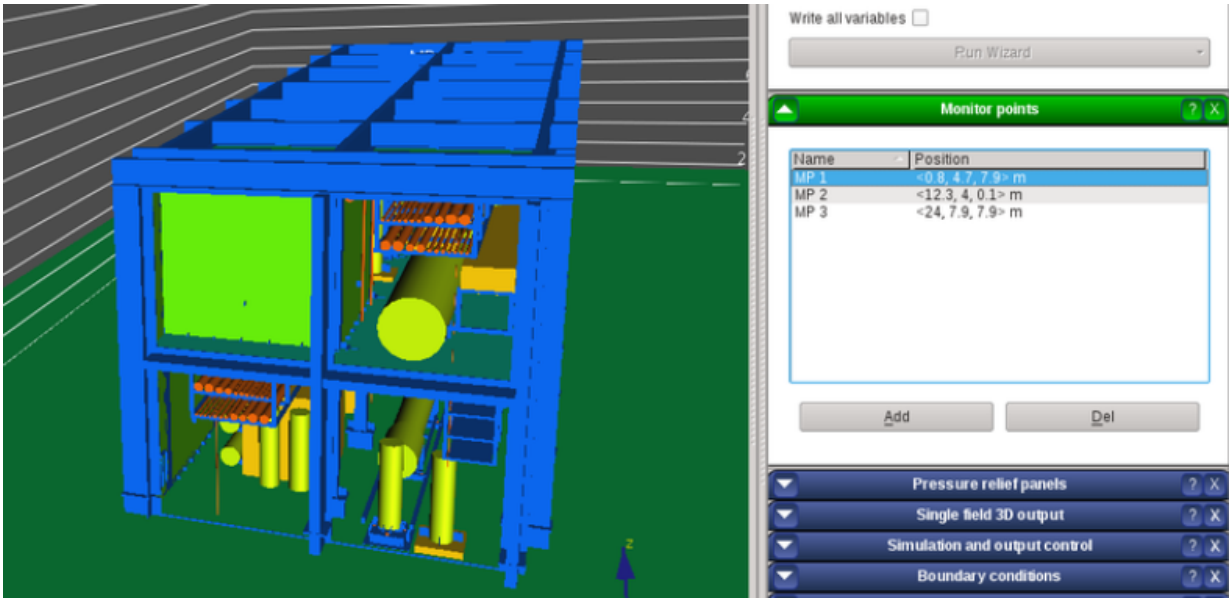


Figura 3.7: Inserimento dei punti di misura

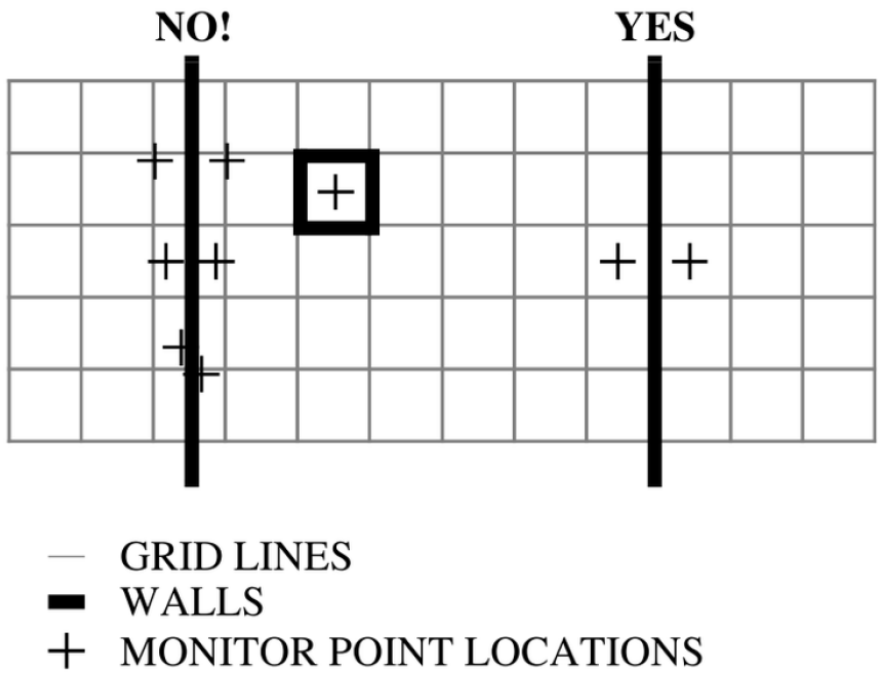


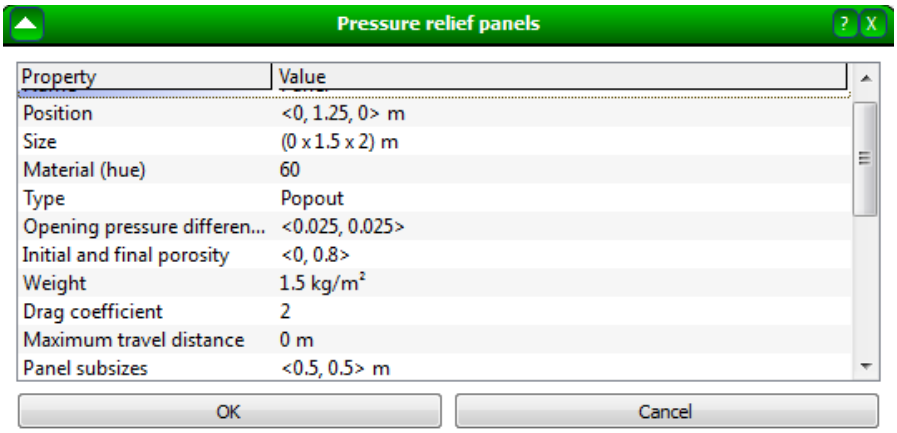
Figura 3.8: Modalità di posizionamento dei punti di misura

put, oppure, se si vuole fare la stessa operazione per un gruppo di punti, basta selezionare tutti i MPs voluti, cliccare con il tasto destro del mouse e cliccare su *"Edit"*.

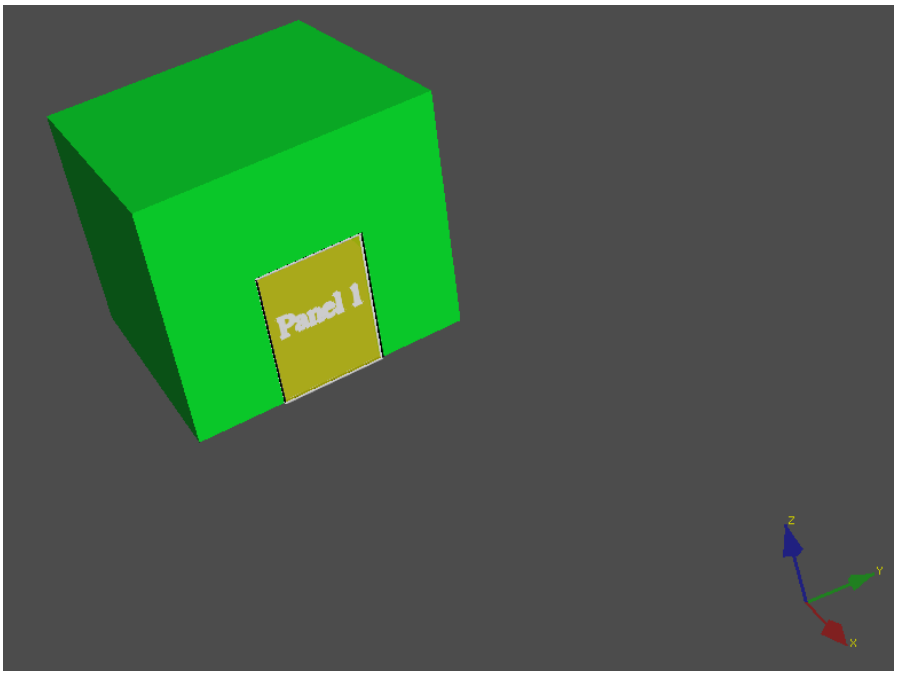
Un problema dei punti di misura riguarda la loro corretta localizzazione nel caso di presenza di pareti (Figura 3.8). Come accennato al paragrafo 3.2 a pagina 22, lo strumento Porcalc per il calcolo delle porosità sposta in automatico i muri in modo che essi coincidano con la linea di griglia più vicino. Se non si allineano preventivamente le pareti alla griglia, infatti, c'è il rischio di avere più MPs all'interno della stessa cella di calcolo e/o in posizioni diverse da quelle desiderate relativamente alle pareti.

3.3.2 Pannelli di riduzione della pressione *(Pressure relief panels)*

I pannelli di riduzione della pressione sono comunemente usati negli impianti industriali come strumento di mitigazione delle sovrappressioni generate da fenomeni esplosivi. Quando la pressione del pannello eccede un certo limite, il pannello si plasticizza e genera un'area di sfogo per la pressione. Nel caso di edifici è possibile attribuire la medesima funzione, per esempio, alle tamponature in muratura.



(a) Caratteristiche del pannello



(b) Geometria del pannello

Figura 3.9: Esempio di pannello di rilascio della pressione

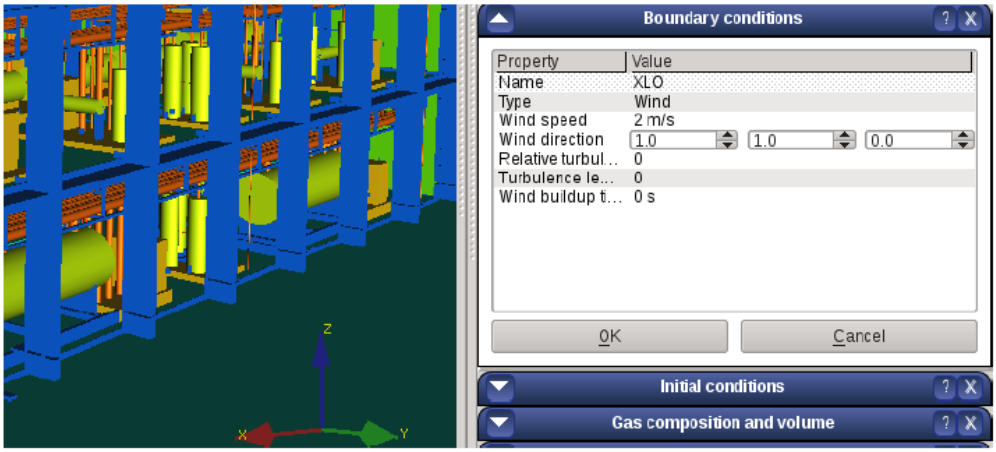


Figura 3.10: Definizione delle condizioni al contorno

In FLACS, questi oggetti sono modellati come elementi piani speciali senza spessore, per i quali possono essere specificati svariati parametri come il cinematismo di collasso, il peso, la pressione netta di rottura del pannello e la porosità iniziale e finale (0 : impermeabile, 1: espulsione totale del pannello). Essi possono inoltre assolvere a stazioni di misura di variabili scalari, analogamente ai MPs.

3.3.3 Condizioni al contorno

Nel menu *"Boundary conditions"* l'utente deve specificare le condizioni al contorno del dominio di calcolo. Le frontiere inferiori in direzione x, y e z sono denotate rispettivamente dalle sigle XLO, YLO e ZLO; analogamente le frontiere superiori da XHI, YHI, ZHI. Le tipologie di condizioni al contorno. selezionabili da un menu a tendina per ciascun contorno del dominio, sono le seguenti:

EULER → risoluzione delle equazioni di Eulero (conservazione di massa e quantità di moto) discretizzate per ciascun elemento della frontiera e applicazione al contorno della pressione atmosferica;

NOZZLE → applicazione formulazioni della foronomia nel caso di flusso subsonico in entrata/uscita e flusso a velocità del suono uscente dal dominio;

PLANE WAVE → estrapolazione della pressione al contorno (non un valore fissato come nel caso delle c.c. di tipo EULER) in modo da eliminare quasi del tutto le riflessioni per onde di pressione dirette verso l'esterno del dominio di calcolo;

WIND → modellazione di un campo di vento esterno al dominio, specificando (manualmente o scegliendo una delle classi di stabilità atmosferica di Pasquill) profili di turbolenza e di velocità al contorno.

In generale, per quel che riguarda la scelta delle condizioni al contorno è opportuno seguire le seguenti raccomandazioni, sinteticamente riportate anche in Tabella 3.1:

- Per la maggior parte delle simulazioni di esplosione si utilizzi la condizione EULER;
- Per le simulazioni di dispersione si utilizzi la condizione al contorno NOZZLE;
- Per le esplosioni in ambiente poco confinato e l'analisi della propagazione dell'onda di sovrappressione nello spazio si utilizzi la condizione PLANE WAVE, posizionando la frontiera del dominio lontano dall'esplosione in modo che i prodotti della combustione non la raggiungano;
- Per la modellazione della superficie del terreno si utilizzi una superficie solida più la condizione al contorno EULER;
- Ciascun bordo del dominio può avere una condizione al contorno differente.

Tabella 3.1: Condizioni al contorno raccomandate a seconda della tipologia di simulazione

Condizione al contorno	**dispersione / ventilazione**	**esplosione: confinata**	**esplosione: non confinata**
EULER/NOZZLE + superficie solida	terreno/mare	terreno/mare	terreno/mare
EULER	–	tutti gli altri	–
NOZZLE	flusso uscente	–	–
PLANE WAVE	–	–	tutti gli altri
WIND	flusso entrante / contorni paralleli	–	–

3.3.4 Condizioni iniziali

Le condizioni iniziali permettono di fissare i valori relativi a turbolenza, temperatura, pressione, costante di gravità, condizioni atmosferiche e composizione dell'aria all'istante temporale di partenza della simulazione (Figura 3.11).

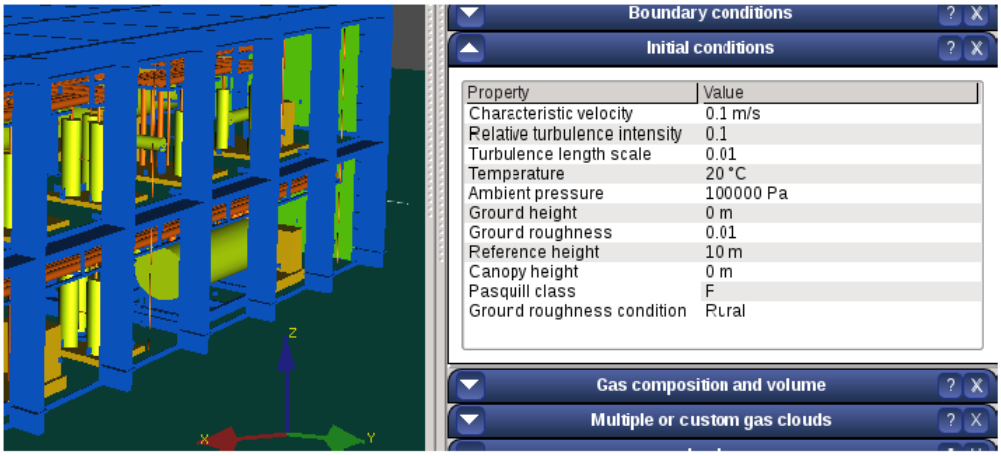


Figura 3.11: Definizione delle condizioni iniziali

L'accelerazione gravitazionale è pari a 9.8 m/s^2 ma può essere fissata a zero nel caso in cui la gravità non abbia alcuna influenza sul moto del fluido.

L'intensità relativa di turbolenza (RTI) è il rapporto tra la componente fluttuante isotropa della velocità u' e la velocità media del flusso U_0:

$$I_T = \frac{u'}{U_0}, \tag{3.1}$$

con valore generalmente compreso tra 0.0 e 0.1. Noti I_T e U_0 è possibile ottenere u' e dunque calcolare il valore dell'energia cinetica turbolenta all'inizio della simulazione:

$$k = 3/2u'^2. \tag{3.2}$$

Per la lunghezza di scala della turbolenza ℓ_{LT} un valore iniziale ragionevole può essere compreso tra il 10% di una dimensione del volume di controllo (per scenari con basso livello di congestione e presenza di aree di sfogo) e un valore caratteristico della dimensione della griglia Δ_g. Questo parametro serve per calcolare il valore iniziale del tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta:

$$\varepsilon = \frac{C_\mu k^{(3/2)}}{\ell_{LT}}, \tag{3.3}$$

dove C_μ è definita alla Tabella 2.1.

La temperatura iniziale è pari a $T_0 = 20°$C e la pressione ambientale iniziale è pari alla pressione atmosferica $P_0 = 10^5$ Pa $= 1$ bar.

In FLACS la normale composizione dell'atmosfera presenta una frazione molare di ossigeno pari al 20.95% ed una frazione molare di azoto pari al 71.05%. Eventuali

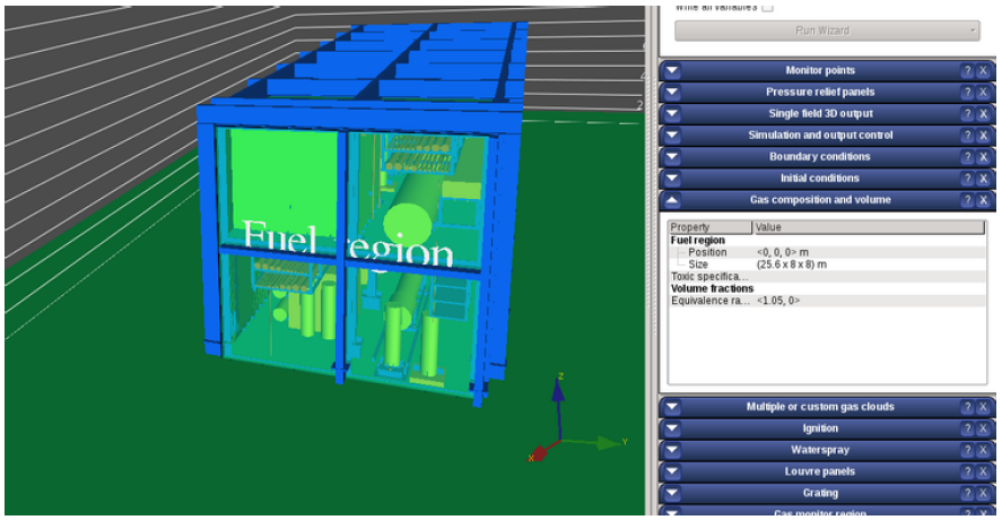


Figura 3.12: Definizione della nube di gas combustibile e della sua composizione

variazioni nella composizione dell'aria influenzano il range di infiammabilità della miscela aria-gas.

É possibile inoltre specificare i valori iniziali dei parametri relativi al vento, alla turbolenza atmosferica (classi di Pasquill) e alla scabrezza del terreno.

3.3.5 Caratteristiche del gas combustibile

La schermata in Figura 3.12 consente la definizione di una nube di gas di forma parallelepipeda, oltre che la concentrazione e la composizione del gas combustibile. Il punto di inserimento della nube è il punto di minimo del parallelepipedo e si specifica in coordinate x-y-z alla voce *"Position"*, mentre le dimensioni della nube si indicano alla voce *"Size"*.

Espandendo il termine *"Volume fractions"* si può specificare la composizione del gas combustibile inserendo le frazioni volumetriche dei componenti elencati nella lista che compare. La concentrazione è data dai fattori di equivalenza (ER0 all'interno della nube di gas ed ER9 al di fuori). Si osservi, inoltre, che la somma delle frazioni di volume non dev'essere necessariamente 1 in quanto FLACS effettua un'operazione di normalizzazione dividendo ciascun valore per la somma di tutte le frazioni di volume maggiori di zero inserite nel programma.

3.3.6 Innesco

L'utente deve specificare la posizione e la dimensione della sorgente d'ignizione dell'esplosione di gas e l'istante temporale in cui avviene l'innesco. La regione

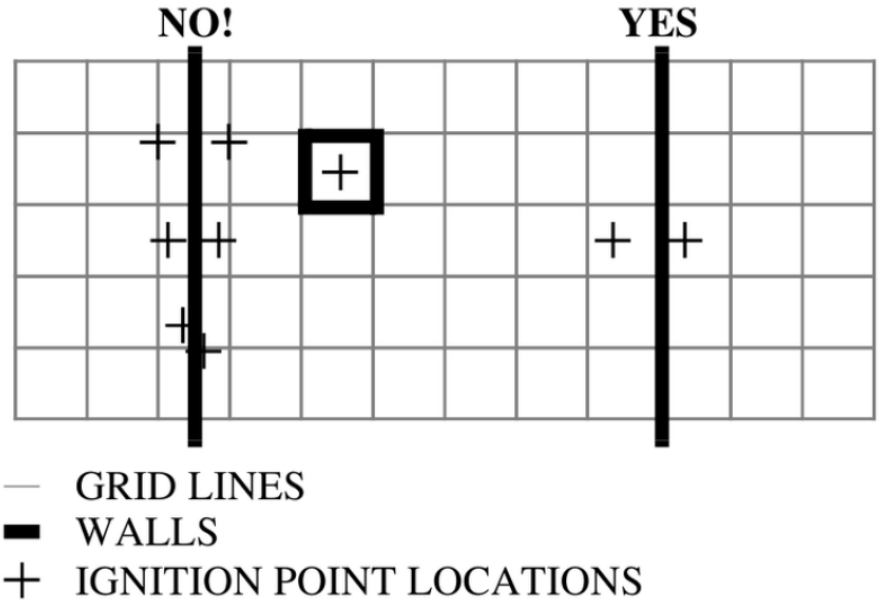


Figura 3.13: Modalità di posizionamento dell'innesco

d'innesco può essere puntuale (0D), lineare (1D), planare (2D) o volumetrica (3D). Per quanto riguarda il corretto posizionamento dell'innesco si veda la Figura 3.13: in generale, è opportuno localizzare l'innesco in base alla griglia computazionale e non alla geometria, onde evitare problemi conseguenti al calcolo delle porosità. Se l'innesco è all'interno di un volume di controllo parzialmente bloccato la fiamma potrebbe spegnersi; tuttavia, è possibile incrementare le dimensioni della regione d'ignizione di $0.05 - 0.10$ m per ottenere un adeguato innesco ed un'adeguata propagazione del fronte di fiamma. Il tempo al quale avviene l'ignizione si pone usualmente a zero, tranne nel caso in cui si vogliano innescare nubi di gas generate a partire da simulazioni di dispersione.

3.3.7 Output variabili di campo 3D

FLACS permette all'utente di generare grafici della distribuzione spaziale delle variabili (per esempio, sezioni 2D e grafici 3D) a diversi istanti temporali.L'utente deve specificare le variabili desiderate da un elenco mostrato in Figura 3.14, tra cui quelle più comuni per la modellazione di un'esplosione sono: la pressione (**P**), la frazione massica dei prodotti della combustione (**PROD**), la concentrazione del gas combustibile (**FMOLE**), la pressione dinamica (**DRAG**), la pressione massima (**P MAX**) e il vettore velocità (**VVEC**). Per definire la quantità e frequenza dei dati di output esistono due parametri:

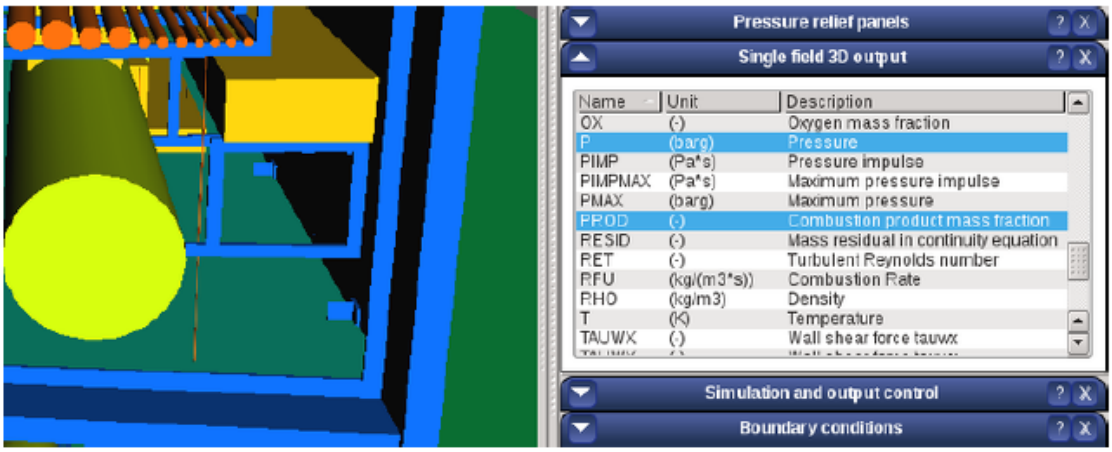


Figura 3.14: Scelta delle variabili di campo da fornire in output

NPLOT E' un parametro impiegato per determinare quanto frequentemente vengono scritti i dati delle variabili di campo durante la simulazione: essi vengono immagazzinati a livelli di combustibile fissati, dove NPLOT è il numero di livelli di combustibile equamente spaziati tra zero ed un massimo. Il livello di combustibile è definito come la totale massa di combustibile corrente diviso l'iniziale massa totale di combustibile;

DTPLOT E' l'intervallo di tempo in secondi per l'output 3D.

Per creare animazioni e video è necessario avere i risultati per almeno $100-200$ step temporali differenti.

3.4 Porosità

Una delle caratteristiche chiave che distingue FLACS dagli altri codici CFD commerciali è costituita dallo sfruttamento del concetto di porosità distribuita per rappresentare geometrie complesse su griglie di calcolo relativamente grossolane. Questo approccio fa sì che gli oggetti più grandi ed i muri siano risolti sulla griglia (*on-grid*), mentre gli oggetti più piccoli siano rappresentati con dimensioni minori rispetto a quelle della griglia (*sub-grid*). Il pre-processore Porcalc legge come input i file di griglia (cg) e geometria (co) ed assegna porosità di volume e di superficie a ciascuna cella della griglia, generando un file cp. Nelle simulazioni, il campo di porosità rappresenta il confinamento e la congestione locale, informazioni che permettono agli oggetti sotto-griglia di contribuire alla resistenza al moto del fluido, alla generazione di turbolenza e all'increspamento del fronte di fiamma.

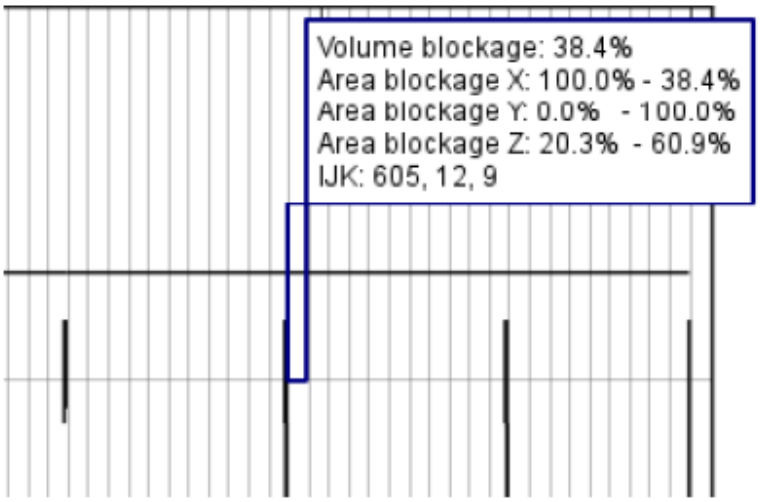


Figura 3.15: Riquadro informativo mostrato in modalità di verifica delle porosità in Flowvis 4

La porosità è un valore compreso tra 0 e 1 che tiene conto del bloccaggio medio di un volume di controllo: il valore 0 indica che il volume è completamente bloccato, viceversa il valore 1 si riferisce ad un volume completamente aperto. La porosità di volume è il congestionamento medio all'interno del volume, mentre la porosità superficiale indica il livello di congestione della faccia del volume considerata. Sono computate dunque 3 porosità di superficie per ciascun volume di controllo, una per ciascuna delle facce su ciascun lato con direzione negativa rispetto all'asse di riferimento.

É possibile, infine, verificare nel dettaglio le porosità, di volume e di superficie, cella per cella, selezionando il comando *"Verify Porosities"* il quale fa avviare il post-processore Flowvis 4. Quando viene attivata questa modalità di verifica compare un riquadro che fornisce informazioni sul livello di congestionamento della cella sulla quale si dispone il cursore del mouse (si veda la Figura 3.15).

3.5 Simulazione

Dopo aver definito e controllato tutti i parametri di input necessari alla realizzazione della simulazione, è necessario aprire il FLACS *Run Manager*, ossia uno strumento che permette di avviare una o più simulazioni e di monitorarle durante la fase di calcolo. Nel caso in cui si vogliano far girare molte simulazioni, è possibile farlo in parallelo sfruttando la natura *multi-core* dei processori senza tuttavia

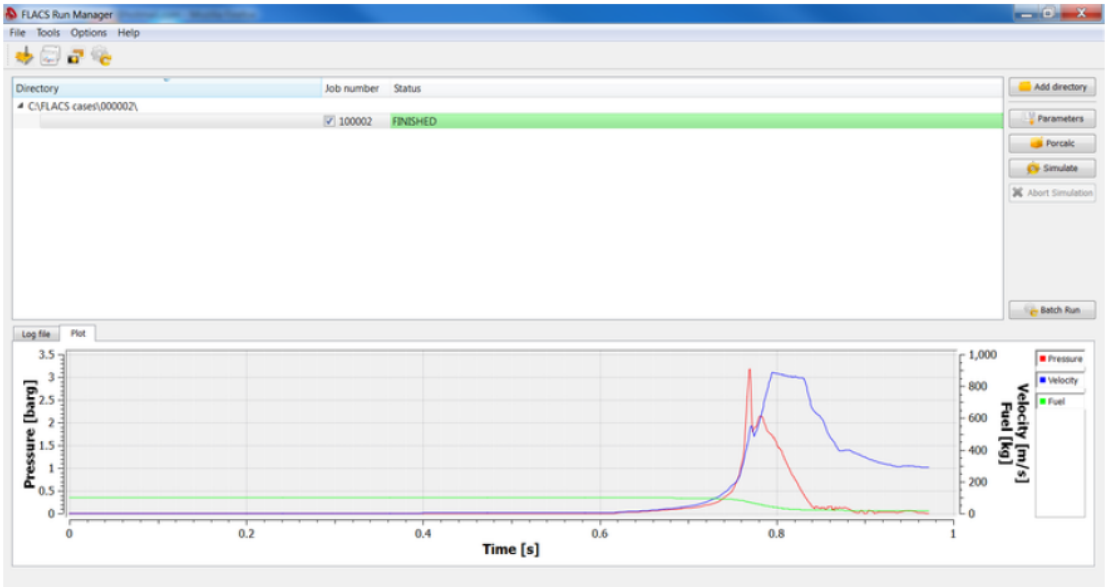


Figura 3.16: Simulazione in FLACS *Run Manager*

esaurire la memoria del computer, pena un aumento del totale tempo di calcolo per le simulazioni.

Il file *log* della simulazione (il cui formato è del tipo **rt010101.dat3**) contiene un resoconto dei messaggi generati dal calcolatore durante una simulazione. Al suo interno si possono pertanto rintracciare messaggi di errore, identificati dal preambolo " *** ", oppure messaggi generici, preceduti da uno spazio ( ) o da un numero (#). Oltre ai suddetti messaggi, nel file log sono presenti informazioni su:

- Volume del dominio di calcolo bloccato dalla presenza della geometria;
- Limiti di infiammabilità e rapporti di equivalenza della miscela aria-gas;
- Quantità di combustibile all'interno del dominio;
- Velocità di reazione di combustione;
- Valori di pressione, velocità, step temporale e altre variabili per ciascuno step temporale al progredire del numero di iterazioni.

3.6 Post-processing

Flowvis, il post-processore di FLACS, è un programma per la visualizzazione dei risultati provenienti da simulazioni di esplosioni e dispersione di gas. Flowvis 5

Figura 3.17: Finestra principale di Flowvis 5

è la versione più recente dello strumento di visualizzazione ed è contenuto nella versione 10.4 di FLACS, che contiene anche Flowvis 4. Flowvis 5 conserva tutte le principali tipologie di grafici principali con potenzialità maggiori di Flowvis 4, sebbene quest'ultima versione abbia alcune funzioni non ancora implementate in Flowvis 5.

La finestra principale di Flowvis 5, mostrata in Figura 3.17, contiene una barra dei menu (*menu bar*), una barra degli strumenti (*tool bar*), l'area in cui vengono mostrati i grafici (*plot area*), un cursore per lo scorrimento dei risultati nel tempo (*time slider*), una barra laterale delle proprietà del grafico (*properties sidebar*, non presente in Flowvis 4) e infine delle schede (*tabs*) tra cui navigare nel caso in cui la presentazione comprenda più di una pagina.

Tra le possibili rappresentazioni grafiche dei risultati si annoverano i grafici 1D, 2D e 3D. I diagrammi variabile scalare-tempo (Figura 3.18) permettono di inserire più variabili scalari, combinando gli output provenienti da diverse simulazioni in diversi punti di misura (MPs) in un unico grafico.

La tipologia di grafico 2D mostra una sezione trasversale del dominio o parte di esso, parallelamente ad un piano della griglia di calcolo. In esso, possono essere inseriti i risultati di output per nessuna, una o due variabili (con legende separate): in quest'ultimo caso, una di esse dev'essere scalare e l'altra vettoriale, in modo che

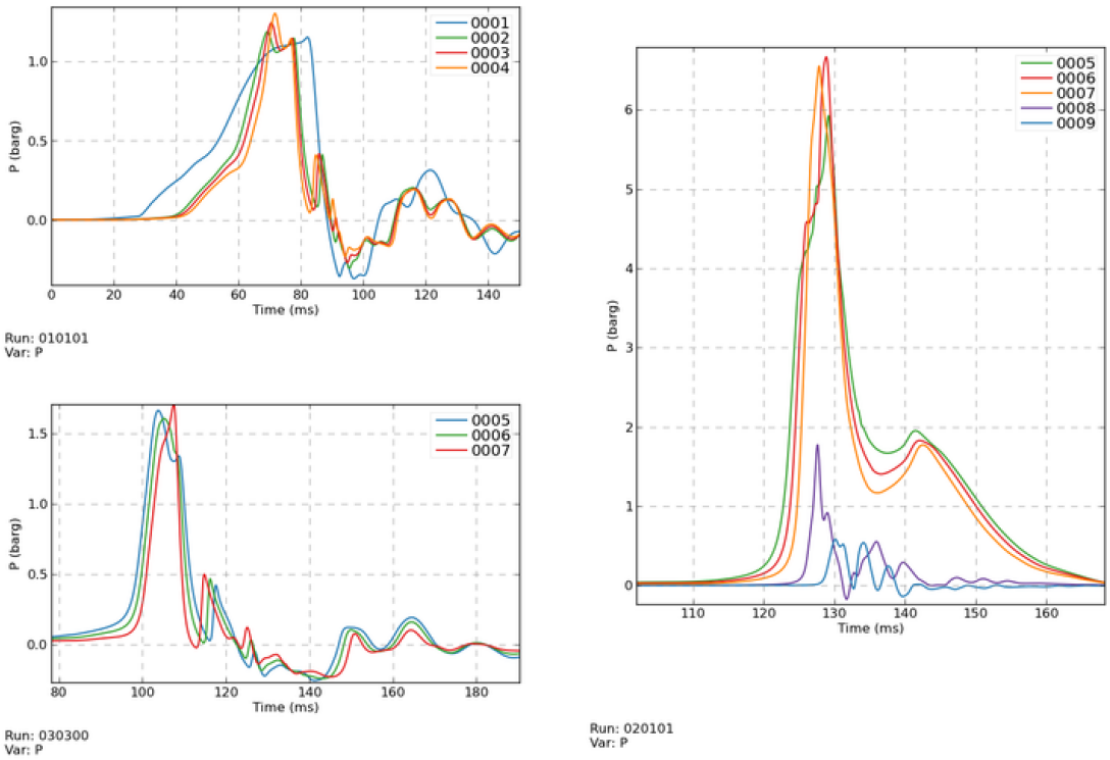


Figura 3.18: Grafici pressione-tempo

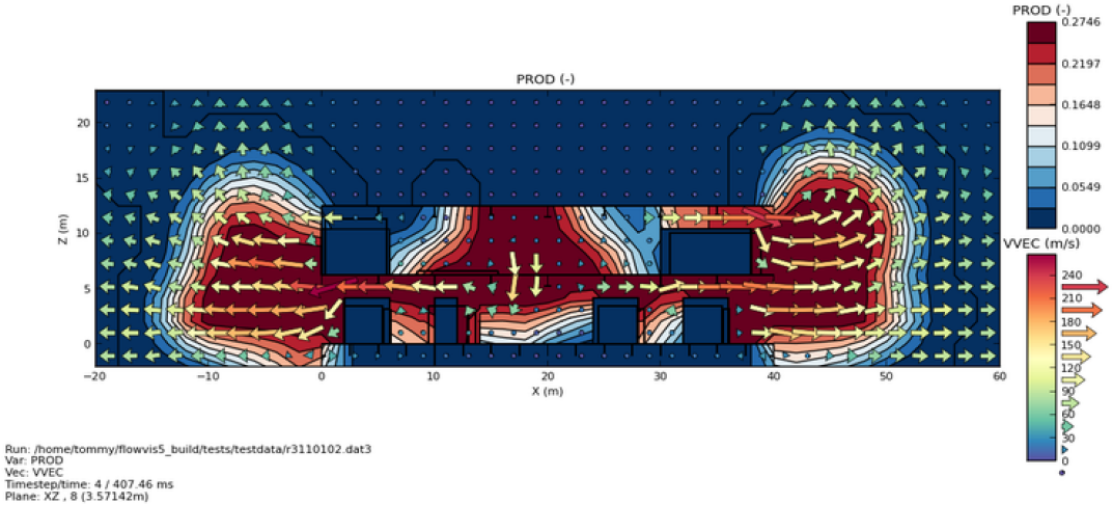


Figura 3.19: Grafico 2D dei prodotti della combustione e del vettore velocità ad una quota ed un istante temporale fissati

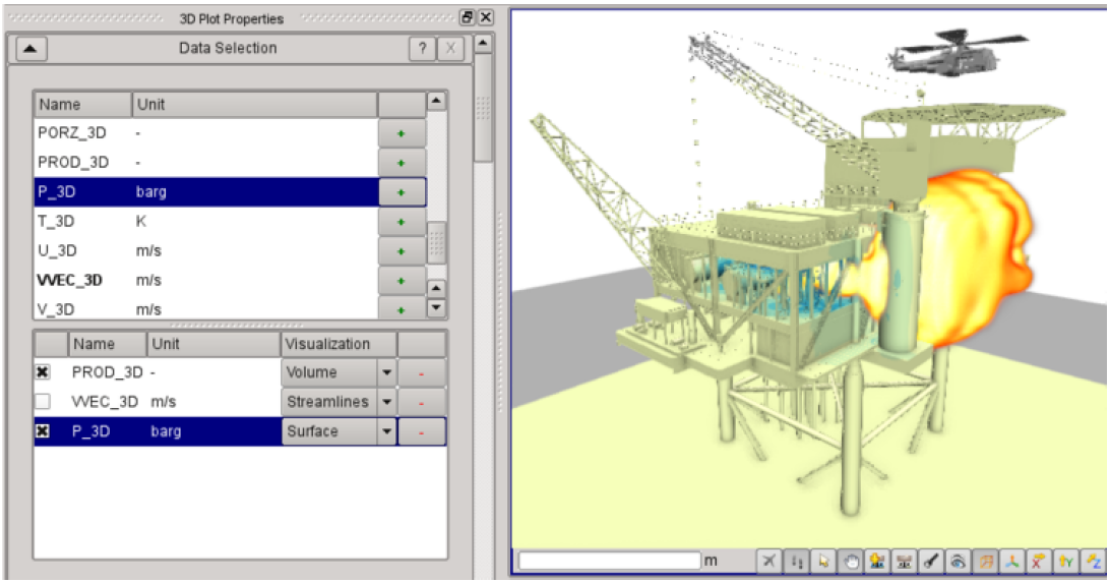


Figura 3.20: Grafico 3D con pressione e prodotti della combustione

la prima possa essere rappresentata mediante contorni colorati e la seconda per mezzo di frecce a dimensione variabile (Figura 3.19). É possibile, in aggiunta, includere la griglia, la geometria e le porosità nel grafico.

La tipologia di grafico 3D mostra una rappresentazione tridimensionale della geometria assieme ai risultati della simulazione: sotto forma di "nube" (dati volumetrici) o come contorni riempiti sulla geometria (dati superficiali) per le variabili scalari; sotto forma di glifi o linee per le variabili vettoriali. Si noti che i grafici tridimensionali dovrebbero essere usati con scopo di rappresentazione puramente qualitativa e non quantitativa, per la quale sono molto più accurati i valori mostrati nei punti di misura o nei grafici 2D. In Figura 3.20 sono mostrati i risultati di più variabili con diverse modalità di rappresentazione: i prodotti della combustione (PROD) sono sotto forma di dati volumetrici, mentre le superfici della geometria sono colorate in base ai valori della pressione (P).

Esiste, inoltre, la possibilità di estrarre file numerici in formato ASCII grazie allo strumento Gutils (Figura 3.21), la cui interfaccia grafica permette di selezionare le variabili di output (sia nei punti di misura, sia 3D) delle quali si desidera avere i risultati in un formato che permetta di importarli in altri software di elaborazione dati quale, per esempio, MatLab®.

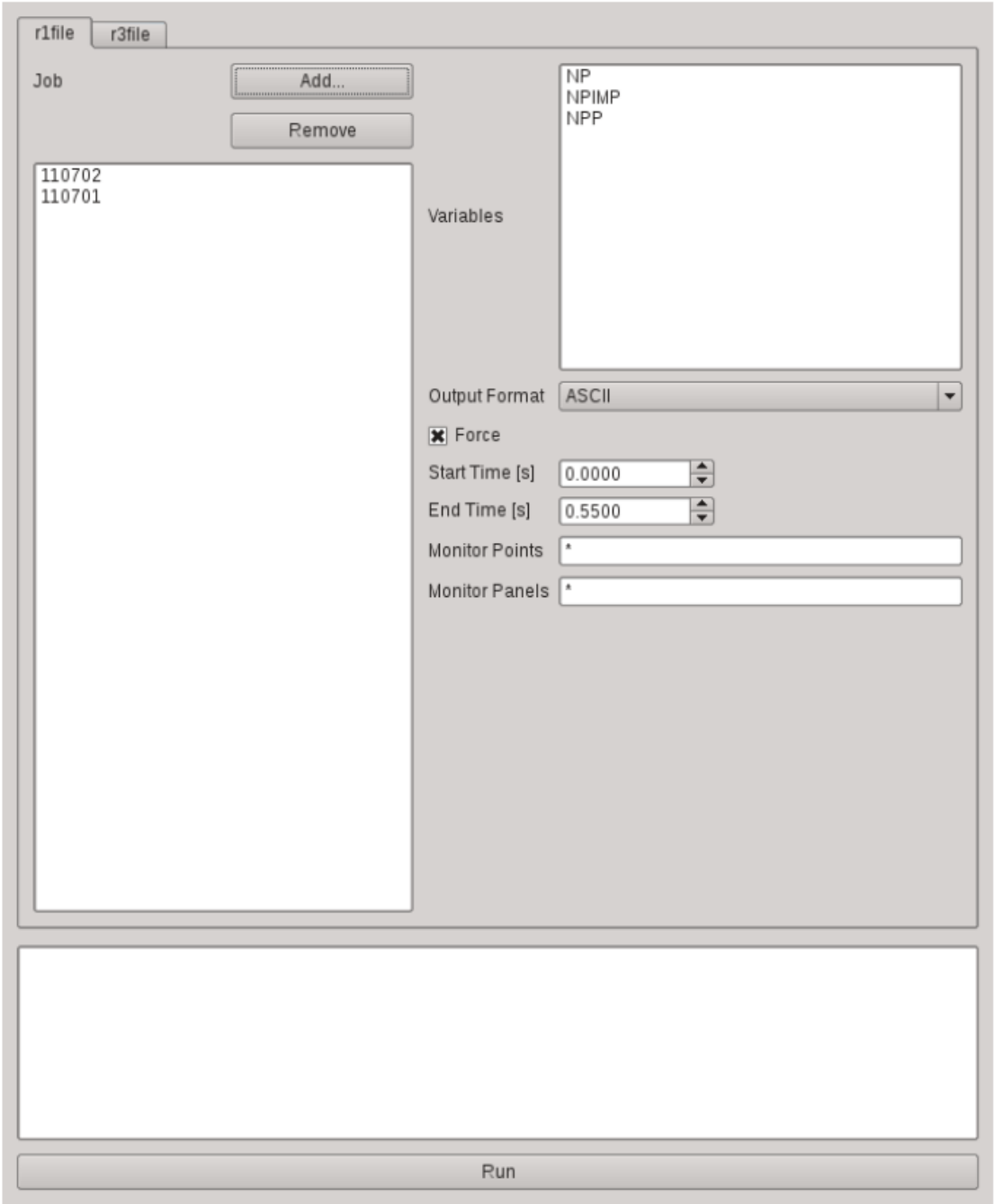


Figura 3.21: Interfaccia dello strumento di estrazione dei risultati Gutils

Capitolo 4

Conclusioni

La corretta comprensione delle equazioni e dei modelli alla base del software FLACS v.10.4 ha rappresentato una base fondamentale ai fini del lavoro perpetrato nella tesi di Laurea Magistrale in corso di svolgimento.

Nella prima parte, difatti, verranno analizzati due problemi test (uno di dispersione ed uno di esplosione) finalizzati alla dimostrazione del corretto comportamento del software in casi caratterizzati da una geometria semplice.

In parallelo si procederà alla creazione del modello fisico di un caso reale di esplosione in un edificio in calcestruzzo armato, sulla base del reportage fotografico e dei verbali forniti dal Nucleo Investigativo Antincendi dei Vigili del Fuoco situato in Largo Santa Barbara, 2 - Roma.

Terminata la fase di realizzazione del modello, si passerà alla fase di calibrazione dello stesso, effettuando analisi di sensitività di parametri quali la risoluzione spaziale della griglia di calcolo, il livello di congestione interna, il punto di innesco dell'esplosione e la natura e reattività del gas combustibile, con l'obiettivo di individuare la simulazione le cui conseguenze maggiormente corrispondano al meccanismo di collasso osservato.

Sarà possibile, infine, estrapolare i risultati provenienti dal software FLACS per implementarli in un software di analisi strutturale, quale SAP2000, applicando alla struttura i carichi da esplosione (coerentemente con l'Eurocodice 1) e studiandone il comportamento dinamico.