



**Politecnico  
di Torino**

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Energetica e Nucleare

A.a. 2025/2026

Sessione di Laurea Marzo 2026

# **Analisi e modellazione di rilasci incidentali di CO<sub>2</sub> in fase gassosa e liquida**

Relatori:

Prof. Andrea Carpignano

Candidati:

Chiara Mosoni s331667

Correlatori:

Ing. Luca Portè

Ing. Valentina Furfaro

PhD Candidate Emanuela Bruno



# ABSTRACT

La crescente diffusione delle tecnologie di cattura, trasporto e stoccaggio della CO<sub>2</sub> impone una rivalutazione critica dei rischi associati a rilasci incidentali in condizioni operative non convenzionali. Sebbene comunemente considerata una sostanza a bassa pericolosità, l'anidride carbonica può manifestare comportamenti complessi in caso di rilascio pressurizzato, soprattutto quando coinvolge transizioni di fase, raffreddamento criogenico e formazione di nubi dense.

In questa tesi vengono analizzati e modellati rilasci incidentali di CO<sub>2</sub> in fase gassosa e liquida, con l'obiettivo di confrontare in modo sistematico le prestazioni e i limiti di diversi strumenti di simulazione: un modello integrale (DNV PHAST) e due approcci CFD tridimensionali (FLACS e Ansys Fluent), applicati a un caso studio realistico di piattaforma offshore caratterizzata da geometrie complesse e ostacoli strutturali in grado di influenzare significativamente il campo di moto e la dispersione.

Per i rilasci in fase gassosa, i diversi strumenti restituiscono distanze di danno dello stesso ordine di grandezza, con scostamenti inferiori al 10%. Tuttavia, le aree effettivamente interessate dalla nube risultano sensibilmente differenti, con riduzioni dell'ordine del 35% nei modelli CFD rispetto all'approccio integrale. La rappresentazione esplicita della geometria e la modellazione della turbolenza evidenziano effetti di canalizzazione, ristagno e ricaduta gravitazionale propri della CO<sub>2</sub>, mostrando come metriche basate esclusivamente sulla distanza non siano sufficienti a descrivere l'estensione spaziale dell'impatto in ambienti complessi.

Per i rilasci in fase liquida, le differenze tra i modelli risultano ancora più marcate e strettamente dipendenti dalla definizione della sorgente bifase, dalla gestione delle transizioni di fase e dal trattamento del raffreddamento criogenico. Le divergenze emergono già nell'analisi delle conseguenze (campi di concentrazione e persistenza della nube) e si riflettono, in una fase successiva, nella determinazione delle aree di danno mediante l'applicazione dei criteri di vulnerabilità, rispetto ai quali non esiste ancora un consenso univoco.

Il lavoro evidenzia le attuali criticità nella modellazione dei rilasci di CO<sub>2</sub> in condizioni criogeniche, mettendo in luce la forte sensibilità dei risultati alla definizione della

sorgente e alle ipotesi di transizione di fase. Allo stesso tempo, dimostra che l'impiego della CFD permette di descrivere in modo più realistico l'interazione tra la nube e la geometria della piattaforma, individuando aree effettivamente coinvolte che non emergono con modelli integrali semplificati. Ne deriva la necessità di una definizione più rigorosa dei criteri di vulnerabilità per la valutazione del rischio, così da supportare in modo più sistematico le future analisi di rischio legate alle infrastrutture di trasporto e stoccaggio della CO<sub>2</sub>.

## ABSTRACT (Inglese)

The increasing deployment of carbon capture, transport, and storage (CCS) technologies calls for a critical reassessment of the risks associated with accidental releases under non-conventional operating conditions. Although commonly regarded as a low-hazard substance, carbon dioxide can exhibit complex behaviour when released under pressure, particularly when phase transitions, cryogenic cooling, and dense cloud formation are involved.

This thesis models and analyses accidental releases of CO<sub>2</sub>, in both gaseous and liquid phases, with the aim of systematically comparing the performance and limitations of different simulation tools: an integral model (DNV PHAST) and two three-dimensional CFD approaches (FLACS and Ansys Fluent), applied to a realistic offshore platform case study characterized by complex geometries and structural obstacles capable of significantly influencing flow fields and dispersion patterns.

For gaseous-phase releases, the different tools predict impact distances of the same order of magnitude, with deviations below 10%. However, the areas affected by the cloud differ significantly, with reductions on the order of 35% in the CFD models compared to the integral approach.

The explicit representation of geometry and turbulence modeling highlights channelling effects, stagnation, and gravitational settling typical of CO<sub>2</sub>, showing that metrics based solely on distance are insufficient to describe the spatial extent of impact in complex environments.

For liquid-phase releases, the differences between the models are even more pronounced and are strongly dependent on the definition of the two-phase source, the treatment of phase transitions, and the modeling of cryogenic cooling. Divergences emerge already in the consequence analysis stage (concentration fields and cloud persistence) and are subsequently reflected in the determination of damage areas through the application of vulnerability criteria, for which no unified consensus currently exists.

This work highlights current challenges in modeling CO<sub>2</sub> releases under cryogenic conditions, emphasizing the strong sensitivity of results to source definition and phase-transition assumptions. At the same time, it demonstrates that CFD enables a more

realistic description of the interaction between the cloud and platform geometry, identifying affected areas that do not emerge from simplified integral models. This points to the need for a more rigorous definition of vulnerability criteria for risk assessment, to more systematically support future risk analyses related to CO<sub>2</sub>, transport and storage infrastructures.





## INDICE

|                                                                                  |    |
|----------------------------------------------------------------------------------|----|
| ABSTRACT .....                                                                   | 3  |
| ABSTRACT (INGLESE) .....                                                         | 5  |
| INTRODUZIONE .....                                                               | 21 |
| Struttura tesi.....                                                              | 22 |
| 1 ANALISI DELLA CO <sub>2</sub> : CONTESTO .....                                 | 25 |
| 1.1 Premessa .....                                                               | 25 |
| 1.2 Le proprietà fisico – chimiche dell’anidride carbonica .....                 | 26 |
| 1.2.1 Stati della materia e diagramma di fase .....                              | 28 |
| 1.3 Rilascio di CO <sub>2</sub> .....                                            | 29 |
| 1.3.1 Effetto di Joule – Thomson .....                                           | 30 |
| 1.4 Le proprietà tossicologiche della CO <sub>2</sub> .....                      | 32 |
| 1.4.1 Meccanismi tossicologici ed effetti dell’esposizione acuta.....            | 33 |
| 1.4.2 Effetti dell’esposizione cronica .....                                     | 34 |
| 1.4.3 Limiti normativi di esposizione .....                                      | 35 |
| 1.5 Effetti criogenici .....                                                     | 37 |
| 1.5.1 Effetti criogenici sull’uomo .....                                         | 37 |
| 1.5.2 Effetti criogenici sulle strutture .....                                   | 39 |
| 1.6 Criteri di vulnerabilità per la valutazione del rischio .....                | 40 |
| 1.6.1 Criteri di vulnerabilità per l’uomo .....                                  | 41 |
| 1.6.2 Criteri di vulnerabilità per le strutture .....                            | 46 |
| 1.6.3 Sintesi dei meccanismi criogenici e parametri rilevanti .....              | 50 |
| 1.7 Sintesi critica della fisica dei rilasci e dei criteri di vulnerabilità..... | 51 |
| 2 MODELLAZIONE DEI RILASCI DI CO <sub>2</sub> : STATO DELL’ARTE .....            | 53 |

|       |                                                                                                  |     |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2.1   | Approcci alla modellazione dei rilasci di CO <sub>2</sub> .....                                  | 54  |
| 2.1.1 | Modelli analitici e semi-empirici per la dispersione di CO <sub>2</sub> .....                    | 55  |
| 2.1.2 | Modelli CFD per la dispersione di CO <sub>2</sub> .....                                          | 57  |
| 3     | METODOLOGIA.....                                                                                 | 63  |
| 3.1   | Descrizione dell'approccio di modellazione .....                                                 | 63  |
| 3.1.1 | Confronto tra i modelli .....                                                                    | 64  |
| 3.1.2 | Criteri di vulnerabilità e confronto con la normativa .....                                      | 65  |
| 3.1.3 | Processo iterativo.....                                                                          | 65  |
| 4     | CASI STUDIO E IMPOSTAZIONE DEI MODELLI.....                                                      | 67  |
| 4.1   | Inquadramento generale dei casi studio.....                                                      | 67  |
| 4.1.1 | Riferimento sperimentale: galleria del vento SEASTAR WT.....                                     | 68  |
| 4.1.2 | Definizione del dominio geometrico .....                                                         | 69  |
| 4.1.3 | Definizione degli scenari di rilascio .....                                                      | 71  |
| 4.1.4 | Monitor points .....                                                                             | 75  |
| 4.2   | Impostazione dei modelli.....                                                                    | 76  |
| 4.2.1 | Parametri caratteristici del rilascio e la loro implementazione nei modelli di simulazione ..... | 77  |
| 4.3   | PHAST.....                                                                                       | 79  |
| 4.4   | FLACS.....                                                                                       | 80  |
| 4.4.1 | Modellazione del rilascio gassoso .....                                                          | 81  |
| 4.4.2 | Modellazione del rilascio liquido .....                                                          | 82  |
| 4.5   | Ansys Fluent .....                                                                               | 85  |
| 4.5.1 | Modellazione del rilascio gassoso .....                                                          | 85  |
| 4.5.2 | Modellazione del rilascio liquido .....                                                          | 89  |
| 5     | ANALISI DEI RILASCI DI CO <sub>2</sub> IN FASE GASSOSA.....                                      | 101 |
| 5.1   | Analisi dei risultati – PHAST .....                                                              | 101 |

|       |                                                                              |     |
|-------|------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 5.2   | Analisi dei risultati – FLACS .....                                          | 104 |
| 5.3   | Analisi dei risultati – Ansys Fluent .....                                   | 107 |
| 5.4   | Sintesi dei risultati .....                                                  | 109 |
| 5.5   | Confronto dei modelli di simulazione .....                                   | 110 |
| 5.5.1 | Approccio comparativo e criteri di analisi .....                             | 111 |
| 5.5.2 | Analisi comparativa: FLACS e Fluent .....                                    | 112 |
| 5.5.3 | Estensione del confronto a PHAST .....                                       | 117 |
| 5.6   | Analisi dei criteri di vulnerabilità per i rilasci gassosi .....             | 121 |
| 5.6.1 | Definizione operativa dei criteri di vulnerabilità adottati.....             | 121 |
| 5.6.2 | Applicazione dei criteri di vulnerabilità ai modelli di dispersione.....     | 122 |
| 5.6.3 | Confronto tra i diversi software e i criteri di vulnerabilità adottati ..... | 128 |
| 6     | ANALISI DEI RILASCI DI CO <sub>2</sub> IN FASE LIQUIDA .....                 | 131 |
| 6.1   | Analisi dei risultati – PHAST .....                                          | 131 |
| 6.2   | Analisi dei risultati – FLACS .....                                          | 134 |
| 6.3   | Analisi dei risultati – Ansys Fluent .....                                   | 136 |
| 6.4   | Confronto dei modelli di simulazione .....                                   | 141 |
| 6.4.1 | Approccio comparativo e criteri d'analisi .....                              | 141 |
| 6.4.2 | Analisi comparativa dei modelli.....                                         | 143 |
| 6.4.3 | Confronto sulle distanze di propagazione .....                               | 145 |
| 6.4.4 | Confronto sui campi di temperatura .....                                     | 148 |
| 6.4.5 | Analisi ai monitor points .....                                              | 151 |
| 6.4.6 | Sintesi del confronto .....                                                  | 154 |
| 6.5   | Analisi dei criteri di vulnerabilità per i rilasci liquidi .....             | 155 |
| 6.5.1 | Vulnerabilità umana: asfissia e tossicità.....                               | 155 |
| 6.5.2 | Vulnerabilità umana: effetti criogenici.....                                 | 162 |
| 6.5.3 | Vulnerabilità umana: sintesi .....                                           | 166 |

|        |                                                                                   |     |
|--------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.5.4  | Vulnerabilità delle strutture .....                                               | 167 |
| 6.5.5  | Vulnerabilità strutturale: sintesi.....                                           | 171 |
| 7      | DISCUSSIONE FINALE, CONCLUSIONI E PROSPETTIVE FUTURE.....                         | 173 |
|        | BIBLIOGRAFIA .....                                                                | 177 |
|        | APPENDICE A: IMPOSTAZIONE DEI MODELLI .....                                       | 185 |
| A.1    | PHAST.....                                                                        | 185 |
| A.2    | FLACS.....                                                                        | 187 |
| A.3    | Ansys Fluent .....                                                                | 189 |
| A.3.1. | Modellazione del rilascio gassoso – approccio SBAM.....                           | 189 |
| A.3.2. | Modellazione del rilascio liquido .....                                           | 190 |
|        | APPENDICE B: DEFINIZIONE DEL TOOL PER IL CALCOLO DELLA <i>PSEUDO SOURCE</i> ..... | 192 |
|        | APPENDICE C: DEFINIZIONE DEL <i>USER DEFINED MATERIAL DATABASE</i> .....          | 197 |
|        | APPENDICE D: DEFINIZIONE DELLE UDF .....                                          | 198 |
|        | APPENDICE E: CODICE PER IL CONFRONTO AI MP .....                                  | 202 |
|        | RINGRAZIAMENTI.....                                                               | 207 |

## INDICE DELLE FIGURE

|                                                                                                                                                                                                                        |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1 - Diagramma di fase dell'anidride carbonica (CO <sub>2</sub> ) [7] .....                                                                                                                                      | 28 |
| Figura 2 - Curva di inversione JT per la CO <sub>2</sub> .....                                                                                                                                                         | 31 |
| Figura 3 - Dinamica del rilascio di CO <sub>2</sub> pressurizzata e della sublimazione delle banche con riferimento a una scala temporale generale. [21] .....                                                         | 39 |
| Figura 4 - (A) Schema del DBT e (B) vari metodi per rappresentare il DBTT in un grafico dell'energia d'impatto in funzione della temperatura. [24] .....                                                               | 40 |
| Figura 5 - Letalità del personale all'aperto per liquidi/spruzzi criogenici e gas/vapori [12] .....                                                                                                                    | 43 |
| Figura 6 - Tenacità alla frattura di vari metalli a basse temperature. [19] .....                                                                                                                                      | 46 |
| Figura 7 - Distribuzioni della temperatura di impatto dei getti di CO <sub>2</sub> liquida con diverse dimensioni del foro e distanze di impatto. [31] .....                                                           | 48 |
| Figura 8 - Risultati calcolati della velocità del getto e della forza d'impatto in diverse condizioni (L = 0,25 m). [31] .....                                                                                         | 48 |
| Figura 9 - Distribuzione della velocità all'interno del dominio di perdita a 10 ms: (a) grafico del contorno nel piano XOY e (b) variazione della velocità lungo l'asse del foro di perdita. [34] .....                | 49 |
| Figura 10 - Mock-up del modello 1:10 in galleria del vento .....                                                                                                                                                       | 68 |
| Figura 11 - Sensoristica presente sul mock-up .....                                                                                                                                                                    | 69 |
| Figura 12 - Geometria CAD del ponte della piattaforma offshore con le sue dimensioni. [49] .....                                                                                                                       | 70 |
| Figura 13 - Vista dall'alto della geometria CAD del ponte con una rappresentazione schematica delle posizioni e delle direzioni delle perdite (puntini/frecce rossi) e delle direzioni del vento (frecce ciano). ..... | 71 |
| Figura 14 - Diagramma di stato della CO <sub>2</sub> con indicazione dei punti di rilascio considerati .....                                                                                                           | 74 |
| Figura 15 - Rappresentazione grafica delle posizioni dei sensori del gas sul ponte della piattaforma (punti rossi) con i corrispondenti numeri di etichetta, nonché delle posizioni                                    |    |

|                                                                                                                                                                                         |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| e direzioni di rilascio considerate nei casi di studio (punti gialli e frecce), nel caso seguente solo pos#1. [49] .....                                                                | 76  |
| Figura 16 - Griglia di calcolo per modello FLACS .....                                                                                                                                  | 81  |
| Figura 17 - Schema concettuale del rilascio liquido con approccio ingegneristico [50] .....                                                                                             | 83  |
| Figura 18 - Schema logico del modello SBAM [49] .....                                                                                                                                   | 86  |
| Figura 19 - (A) Dispersione a getto di CO <sub>2</sub> liquida; (B) diagramma di fase di pressione ed entalpia della CO <sub>2</sub> . [28] .....                                       | 90  |
| Figura 20 - Flowchart computazionale della source model [28] .....                                                                                                                      | 93  |
| Figura 21 - Flowchart computazionale completo [28] .....                                                                                                                                | 98  |
| Figura 22 - Massima estensione della nube di CO <sub>2</sub> - PHAST .....                                                                                                              | 102 |
| Figura 23 - Vista laterale della nube di CO <sub>2</sub> - PHAST .....                                                                                                                  | 103 |
| Figura 24 - Concentrazione massima in funzione della distanza - PHAST .....                                                                                                             | 103 |
| Figura 25 - Distribuzione della frazione molare CO <sub>2</sub> : a) configurazione vento 0°; b) configurazione vento 45°; c) configurazione vento 90° - FLACS .....                    | 104 |
| Figura 26 - Distribuzione della concentrazione di CO <sub>2</sub> in vista laterale: a) configurazione vento 0°; b) configurazione vento 45°; c) configurazione vento 90° - FLACS ..... | 106 |
| Figura 27 - Distribuzione della frazione molare CO <sub>2</sub> : a) configurazione vento 0°; b) configurazione vento 45°; c) configurazione vento 90° - Ansys Fluent .....             | 107 |
| Figura 28 - Distribuzione della frazione molare CO <sub>2</sub> sul piano xy: a) configurazione vento 0°; b) configurazione vento 45°; c) configurazione vento 90° - Ansys Fluent ..... | 109 |
| Figura 29 - Confronto concentrazione massima ai MP tra FLACS e Fluent; configurazione 0° .....                                                                                          | 113 |
| Figura 30 - Confronto concentrazione massima ai MP tra FLACS e Fluent; configurazione 45° .....                                                                                         | 113 |
| Figura 31 - Distribuzione della frazione molare di CO <sub>2</sub> in configurazione 45°: a) modello FLACS; b) modello Fluent .....                                                     | 114 |

|                                                                                                                                                                            |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 32 - Confronto concentrazione massima ai MP tra FLACS e Fluent; configurazione 90° .....                                                                            | 114 |
| Figura 33 - Distribuzione della frazione molare di CO <sub>2</sub> in configurazione 90°: a) modello FLACS; b) modello Fluent .....                                        | 115 |
| Figura 34 - Confronto distanze lungo l'asse di rilascio per il caso gassoso .....                                                                                          | 118 |
| Figura 35 - Toxic Probability of Death vs Distance .....                                                                                                                   | 123 |
| Figura 36 - Dose tossica cumulata in funzione della distanza dalla sorgente .....                                                                                          | 124 |
| Figura 37 - Mappe di concentrazione per la configurazione con vento parallelo all'asse di rilascio per limiti SLOT (a) e limiti SLOD (b).....                              | 125 |
| Figura 38 – Curva di probabilità di morte estrapolata da curva Probit .....                                                                                                | 127 |
| Figura 39 - Mappe di concentrazione configurazione con vento parallelo all'asse di rilascio per limiti SLOT e SLOD .....                                                   | 127 |
| Figura 40 - Cloud Max Footprint, caso liquido (PHAST).....                                                                                                                 | 132 |
| Figura 41 - Vista laterale delle concentrazioni a soglie date, caso liquido (PHAST) ..                                                                                     | 132 |
| Figura 42 – Concentrazione massima un funzione della distanza a quota fissata (0 m), caso liquido (PHAST) .....                                                            | 133 |
| Figura 43 - Andamento della temperatura in funzione della distanza su modello PHAST .....                                                                                  | 133 |
| Figura 44 – Mappa di concentrazione per rilascio liquido di CO <sub>2</sub> nel modello FLACS per a) configurazione 0°; b) configurazione 45°; c) configurazione 90° ..... | 134 |
| Figura 45 - Mappe di temperatura 2D per rilascio liquido da modello FLACS: a) configurazione 0°; b) configurazione 45°; c) configurazione 90° .....                        | 136 |
| Figura 46 - Campo di concentrazione di CO <sub>2</sub> vista dall'alto: a) configurazione 0°; b) configurazione 45°, c) configurazione 90° .....                           | 137 |
| Figura 47 - Campo di concentrazione di CO <sub>2</sub> vista laterale: a) configurazione 0°; b) configurazione 45°, c) configurazione 90° .....                            | 138 |
| Figura 48 - Campo di temperatura di CO <sub>2</sub> vista dall'alto: a) configurazione 0°; b) configurazione 45°, c) configurazione 90° .....                              | 139 |

|                                                                                                                     |     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Figura 49 - Campo di temperatura di CO <sub>2</sub> vista laterale .....                                            | 140 |
| Figura 50 - Linea di mezzeria del flusso utilizzata per il confronto quantitativo tra i modelli.....                | 143 |
| Figura 51 - Confronto concentrazione in funzione della distanza lungo l'asse di rilascio per i diversi modelli..... | 145 |
| Figura 52 - Andamento della temperatura lungo l'asse di rilascio .....                                              | 149 |
| Figura 53 - Confronto concentrazione massima ai monitor points in Ansys Fluent e FLACS.....                         | 152 |
| Figura 54 - Confronto temperatura minima ai monitor points in Ansys Fluent e FLACS .....                            | 153 |
| Figura 55 - Curva di letalità per rilascio liquido derivante dal modello PHAST .....                                | 156 |
| Figura 56 - Curva di letalità per rilascio liquido derivante dal modello FLACS .....                                | 156 |
| Figura 57 - Curva di letalità per rilascio liquido derivante dal modello Ansys Fluent .....                         | 157 |
| Figura 58 - Confronto letalità FLACS e Ansys Fluent.....                                                            | 158 |
| Figura 59 - Dose tossica in funzione della distanza per modello PHAST rilascio liquido .....                        | 160 |
| Figura 60 - Mappa dei limiti SLOD e SLOT per modello FLACS .....                                                    | 160 |
| Figura 61 - Mappa dei limiti SLOD e SLOT per modello Ansys Fluent .....                                             | 160 |
| Figura 62 - Profili di temperatura dei tre software con soglie limite di esposizione per il personale (IOGP).....   | 163 |
| Figura 63 - Wind Chill Temperature con classi di rischio per il modello di Ansys Fluent .....                       | 165 |
| Figura 64 - Analisi longitudinale dei profili di temperatura per l'analisi della vulnerabilità strutturale.....     | 169 |
| Figura 65 - Mappa della distribuzione spaziale della temperatura sulle strutture .....                              | 170 |
| Figura 66 - Rappresentazione mesh modello SBAM .....                                                                | 189 |

## INDICE DELLE TABELLE

|                                                                                                                          |     |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tabella 1 - Proprietà fisico-chimiche dell'anidride carbonica (CO <sub>2</sub> ) [6].....                                | 27  |
| Tabella 2 - Effetti acuti sulla salute delle alte concentrazioni di CO <sub>2</sub> [15] .....                           | 34  |
| Tabella 3 - Limiti di esposizione [15] .....                                                                             | 36  |
| Tabella 4 - Temperatura di raffreddamento del vento e tempo di congelamento della pelle esposta [28].....                | 45  |
| Tabella 5 - Valori per la valutazione della distanza di pericolo [28] .....                                              | 50  |
| Tabella 6 - Condizioni di rilascio per i diversi casi studio .....                                                       | 72  |
| Tabella 7 - Parametri caratteristici del rilascio e la loro implementazione nei diversi strumenti di simulazione.....    | 78  |
| Tabella 8 - Parametri caratteristici della sorgente equivalente di CO <sub>2</sub> liquida per modello FLACS.....        | 84  |
| Tabella 9 - Parametri caratteristici della sorgente equivalente di CO <sub>2</sub> liquida per modello ANSYS Fluent..... | 94  |
| Tabella 10 - Proprietà dei materiali .....                                                                               | 96  |
| Tabella 11 - Coefficienti per le proprietà della CO <sub>2</sub> .....                                                   | 97  |
| Tabella 12 - Criteri comuni per la confrontabilità dei modelli.....                                                      | 111 |
| Tabella 13 - Confronto soglie di tossicità per i software considerati .....                                              | 118 |
| Tabella 14 - Sintesi comparativa tra FLACS, Fluent e PHAST per rilascio gassoso di CO <sub>2</sub> .....                 | 120 |
| Tabella 15 – Sintesi delle distanze e aree di pericolo rispetto ai limiti imposti con un'esposizione di 10 minuti.....   | 128 |
| Tabella 16 - Criteri di confronto per il rilascio liquido di CO <sub>2</sub> .....                                       | 141 |
| Tabella 17 - Confronto operativo tra PHAST, FLACS e Ansys Fluent nel rilascio liquido di CO <sub>2</sub> .....           | 144 |
| Tabella 18 - Distanze massime di propagazione per le soglie di riferimento.....                                          | 146 |

|                                                                                                                       |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Tabella 19 - Distanze massime di propagazione ad un'altezza di riferimento di 1,5 m per le soglie di riferimento..... | 146 |
| Tabella 20 - Distanze e aree per i limiti SLOT e SLOD .....                                                           | 161 |
| Tabella 21 - Limiti di letalità IOGP.....                                                                             | 163 |
| Tabella 22 - Temperatura di raffreddamento del vento e tempo di congelamento della pelle esposta [28].....            | 164 |
| Tabella 23 - Confronto soglie di letalità tra criterio IOGP e approccio $T_{wc}$ .....                                | 166 |
| Tabella 24 - Distanze dei limiti di letalità per asfissia ed effetti criogenici .....                                 | 167 |
| Tabella 25 - Limiti di esposizione per la vulnerabilità delle strutture.....                                          | 168 |
| Tabella 26 - Distanze limite per analisi di vulnerabilità strutturale .....                                           | 169 |





# INTRODUZIONE

La crescente complessità dei sistemi industriali contemporanei e l'evoluzione delle tecnologie per la gestione dei fluidi in condizioni estreme impongono una crescente attenzione verso la capacità di prevedere e controllare fenomeni incidentali. In questo contesto, la modellazione dei rilasci di sostanze potenzialmente pericolose rappresenta uno strumento indispensabile per supportare la progettazione degli impianti, l'analisi dei rischi e la definizione di adeguate misure di mitigazione.

Tra le sostanze più frequentemente impiegate nei processi industriali, l'anidride carbonica riveste un ruolo importante: pur essendo un composto chimico ampiamente diffuso e generalmente concepito come poco pericoloso, il suo comportamento in condizioni operative tipiche di molti impianti (pressioni elevate, basse temperature, presenza di fase densa o liquida) può dare luogo a fenomeni complessi durante un rilascio incidentale. La rapida espansione, l'elevato raffreddamento, la possibile formazione di ghiaccio secco e la generazione di nubi fredde e dense rendono la CO<sub>2</sub> un caso di studio particolarmente interessante per la modellazione fluidodinamica.

Parallelamente, il crescente impiego di modelli numerici avanzati, in particolare gli approcci CFD (*Computational Fluid Dynamics*), ha ampliato le possibilità di descrivere in dettaglio i processi transitori associati a un rilascio incidentale. Tuttavia, l'adozione di tali strumenti pone nuove sfide: le approssimazioni necessarie, la variabilità dei modelli implementati nei diversi software, la sensibilità ai parametri numerici e la mancanza di un allineamento metodologico tra i codici più diffusi rendono essenziale un confronto sistematico delle loro prestazioni.

In questo quadro, il presente lavoro nasce con l'obiettivo di analizzare criticamente la capacità dei principali software di simulazione di rappresentare il rilascio di CO<sub>2</sub> in fase gassosa e liquida, mettendo in evidenza punti di forza, limiti e differenze sostanziali tra gli approcci disponibili. L'attenzione non è rivolta esclusivamente alla descrizione del fenomeno, ma anche ai criteri di vulnerabilità utilizzati per interpretare gli esiti delle simulazioni, con particolare riferimento agli effetti sulla salute delle persone e sulle strutture.

Il contributo di questa tesi è quindi duplice: da un lato offre un'analisi approfondita delle soluzioni modellistiche adottate da tre diversi strumenti CFD largamente utilizzati in ambito industriale; dall'altro fornisce un quadro integrato per valutare la coerenza dei risultati ottenuti, la loro robustezza e la loro rilevanza ai fini della sicurezza dei processi.

## Struttura tesi

L'elaborato è organizzato in capitoli strutturati come segue, al fine di guidare il lettore attraverso lo sviluppo del lavoro:

**Capitolo 1** Il primo capitolo fornisce le basi teoriche e scientifiche necessarie per comprendere il comportamento della CO<sub>2</sub> in caso di rilascio incidentale. Vengono introdotte le principali proprietà fisico-chimiche, il diagramma di fase, i meccanismi di espansione e l'effetto di Joule-Thomson, fondamentali per interpretare la possibile formazione di ghiaccio secco e il raffreddamento rapido.

Una parte rilevante è dedicata agli aspetti tossicologici e ai limiti normativi, insieme gli effetti criogenici su persone o strutture, da cui derivano i criteri di vulnerabilità utilizzati nel resto della tesi. Il capitolo si conclude con una sintesi dello stato dell'arte, che mette in evidenza le principali incertezze sperimentali e modellistiche ancora presenti.

**Capitolo 2** Il secondo capitolo è dedicato allo stato dell'arte della modellazione dei rilasci di CO<sub>2</sub> e all'inquadramento metodologico del problema. Vengono discussi i principali approcci di simulazione impiegati nella pratica della sicurezza industriale, distinguendo tra modelli analitici e semi-empirici e modelli basati sulla *Computational Fluid Dynamics* (CFD).

Il capitolo analizza criticamente i diversi strumenti disponibili, incluse le differenze tra codici CFD specialistici e *general-purpose*, mettendone in luce potenzialità e limiti. Questa analisi fornisce il contesto necessario per motivare le scelte metodologiche adottate nei capitoli successivi.

Capitolo 3 Il terzo capitolo descrive la metodologia di simulazione adottata nel presente lavoro. Vengono definiti gli obiettivi dell'utilizzo della CFD, l'impostazione generale dell'approccio di modellazione e la strategia di confronto tra modelli.

Il capitolo introduce il processo iterativo alla base dell'analisi, chiarendo come i diversi strumenti di simulazione vengano utilizzati in modo complementare e come i risultati vengano successivamente interpretati alla luce dei criteri di vulnerabilità.

Capitolo 4 Il quarto capitolo definisce gli scenari di rilascio analizzati, le geometrie considerate e i monitor points utilizzati per interpretare i risultati.

Viene mostrata l'impostazione dei modelli nei tre software scelti: PHAST, FLACS e Ansys Fluent, con particolare attenzione ai parametri fondamentali, alla struttura del dominio e alle differenze nell'approccio alla simulazione.

Capitolo 5 Questo capitolo analizza i risultati relativi ai rilasci di CO<sub>2</sub> in fase gassosa. A partire dai campi di concentrazione e dalla dinamica della nube ottenuti mediante simulazioni CFD, vengono discussi i principali meccanismi di dispersione e accumulo in un contesto geometrico complesso.

Il capitolo include un confronto tra i diversi modelli di simulazione e un'analisi critica dei criteri di vulnerabilità comunemente impiegati nelle QRA, al fine di valutare la coerenza e il grado di conservatività delle stime di rischio per i rilasci gassosi.

Capitolo 6 Il sesto capitolo è dedicato all'analisi dei rilasci di CO<sub>2</sub> in fase liquida. In questo caso l'attenzione è rivolta ai fenomeni criogenici e bifase che caratterizzano tali eventi, includendo il raffreddamento intenso, le transizioni di fase e la persistenza della nube.

Analogamente al Capitolo 5, i risultati vengono utilizzati per confrontare le prestazioni dei diversi modelli di simulazione e per analizzare criticamente i criteri di vulnerabilità, sia in termini di effetti sull'uomo sia per quanto riguarda gli effetti criogenici sulle strutture.

Capitolo 7 L'ultimo capitolo riassume i principali risultati emersi dal confronto tra modelli e dalla simulazione dei rilasci. Vengono discussi i risultati più significativi e le implicazioni per la sicurezza industriale.

Il capitolo evidenzia inoltre le limitazioni ancora presenti nella modellazione dei rilasci di CO<sub>2</sub> e propone possibili sviluppi futuri sia dal punto di vista numerico che sperimentale.

# 1 ANALISI DELLA CO<sub>2</sub>: CONTESTO

## 1.1 Premessa

Nell'attuale contesto globale, la concentrazione di anidride carbonica (CO<sub>2</sub>) nell'atmosfera è ormai diventata uno dei principali fattori alla base del riscaldamento climatico e dei cambiamenti ambientali su larga scala.

La CO<sub>2</sub> è presente nell'atmosfera terrestre in concentrazioni relativamente basse, circa 0,0425% in volume (425 ppmv) [1] ed è prodotta sia naturalmente sia dalle attività umane, mentre le piante la utilizzano nella fotosintesi, chiudendo un ciclo essenziale per l'equilibrio ecologico. Oltre che nell'aria, enormi quantità si trovano disciolte negli oceani e nei laghi, dove partecipa a reazioni chimiche che portano alla formazione di acido carbonico e dei suoi sali, con effetti significativi come l'acidificazione marina [2]. Anche la geosfera contribuisce al rilascio di CO<sub>2</sub>, tramite i vulcani, sorgenti termali e degassamenti, che in particolari condizioni possono dare luogo a eventi pericolosi, come dimostrato nel disastro del lago Nyos in Camerun nel 1986, dove una massiccia emissione improvvisa di CO<sub>2</sub> ha causato migliaia di vittime [3]. Inoltre, la CO<sub>2</sub> è un gas serra, ovvero trattiene parte della radiazione infrarossa che la terra emette, contribuendo all'aumento della temperatura globale, ed è tossico per la salute umana se rilasciata in maniera massiva. Alle fonti naturali si sommano oggi le emissioni antropiche, che hanno innalzato i livelli atmosferici oltre quelli storici.

In Europa, il Green Deal e il pacchetto legislativo “*Fit for 55*” [4] fissano la decarbonizzazione come obiettivo strategico. Ciò significa che la CO<sub>2</sub> non è più soltanto un sottoprodotto da ridurre, ma diventa un materiale da gestire attivamente: catturato, trasportato, stoccato e persino trasformato in prodotti riutilizzabili (*Carbon Capture, Utilization and Storage* - CCUS). Anche in Italia, il Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica (MASE) ha riconosciuto che la CCUS costituisce una delle quattro leve fondamentali per raggiungere la neutralità climatica nel 2050, al pari dell'efficienza energetica, ponendola al centro del PNIEC 2024 e della *National Long-Term Strategy* [5]. Tuttavia, questa nuova prospettiva porta con sé una serie di interrogativi cruciali: si è davvero pronti a trattare la CO<sub>2</sub> come “materia prima industriale”? E si conoscono a sufficienza i rischi che derivano dall'accumularla?

La questione non è solamente teorica. La gestione dell'anidride carbonica introduce problematiche di sicurezza tipiche dei sistemi ad alta pressione, a cui si aggiungono caratteristiche legate alla molecola stessa: in caso di rilascio massivo in ambiente confinato può risultare asfissiante e tossico e può produrre effetti criogenici.

Studiare la CO<sub>2</sub> oggi significa quindi rispondere all'urgenza ambientale della decarbonizzazione e porsi un problema di sicurezza delle soluzioni ingegneristiche che si stanno adottando. Prima di definire delle strategie di cattura e stoccaggio massivo di CO<sub>2</sub>, bisogna capire come si comporta fisicamente e chimicamente, quali sono le conseguenze di un rilascio, quali effetti produce sull'uomo e sulle infrastrutture e quanto siano adeguati gli standard di sicurezza attuali. In questo senso, questa tesi si inserisce come un possibile contributo di approfondimento agli scenari delineati dal rapporto MASE, con l'obiettivo di colmare parte del divario conoscitivo sulle implicazioni di sicurezza e sulla gestione del rischio associato alla filiera CCUS.

## 1.2 Le proprietà fisico – chimiche dell'anidride carbonica

Per comprendere a pieno i rischi e le sfide legati alla gestione della CO<sub>2</sub>, è necessario partire dalle sue basi: le proprietà fisico-chimiche che ne determinano il comportamento in condizioni normali e in scenari di processo. È infatti da queste caratteristiche fondamentali che dipendono tanto le potenzialità di utilizzo e stoccaggio, quanto le modalità e le conseguenze di un eventuale rilascio incidentale.

L'anidride carbonica (CO<sub>2</sub>) è una molecola formata da un atomo di carbonio legato covalentemente a due atomi di ossigeno, caratterizzata da una struttura lineare e apolare, con peso molecolare pari a 44,01 g/mol. La sua stabilità chimica è elevata: non è infiammabile, non è combustibile e si trova con il carbonio nello stato di ossidazione massimo (+IV). Queste proprietà la rendono una molecola relativamente inerziale, capace però di giocare un ruolo fondamentale nei cicli biogeochimici del pianeta e in molti processi industriali.

Dal punto di vista fisico, a temperatura ambiente e pressione atmosferica, la CO<sub>2</sub> è un gas incolore e inodore, con densità pari a 1,98 kg/m<sup>3</sup>, circa una volta e mezza quella dell'aria. Questo valore fa sì che tenda ad accumularsi negli strati più bassi dell'atmosfera e negli

spazi confinati, caratteristica da tenere in conto in casi di rilasci incidentali. La solubilità in acqua è relativamente limitata, 1,45 g/L a 25°C e 1 bar e diminuisce al crescere della temperatura. La dissoluzione è invece favorita dall'aumento di pressione, caratteristica sfruttata in applicazioni industriali.

In Tabella 1 viene riportato un riassunto delle principali proprietà fisico-chimiche dell'anidride carbonica.

*Tabella 1 - Proprietà fisico-chimiche dell'anidride carbonica (CO<sub>2</sub>) [6]*

| Proprietà                                 | Valore                  |
|-------------------------------------------|-------------------------|
| Peso molecolare                           | 44,010 kg/kmol          |
| Densità del gas (0°C; 0,1 MPa)            | 1,977 kg/m <sup>3</sup> |
| Densità specifica rispetto all'aria       | 1,5291                  |
| Calore di formazione                      | -393,51 kJ/mol          |
| Energia libera di formazione              | -394,2 kJ/mol           |
| Calore specifico costante (gas a 0,1 MPa) |                         |
| a 0°C                                     | 0,8277 J/gK             |
| a 20°C                                    | 0,8459 J/gK             |
| a 60°C                                    | 0,8833 J/gK             |
| Temperatura critica                       | 31,04 °C                |
| Pressione critica                         | 7,383 MPa               |
| Densità al punto triplo                   | 468 kg/m <sup>3</sup>   |
| Temperatura al punto triplo               | -56,57 °C               |
| Pressione al punto triplo                 | 0,518 MPa               |
| Calore di fusione                         | 195,82 J/g              |
| Temperatura di sublimazione               | -78,92 °C               |
| Pressione di sublimazione                 | 0,9807 MPa              |
| Effetto Joule – Thomson a 101,3 kPa       |                         |
| a -50°C                                   | 24,130 °C/MPa           |

|                                    |        |                           |
|------------------------------------|--------|---------------------------|
|                                    | a 0°C  | 12,900 °C/MPa             |
|                                    | a 50°C | 8,950 °C/MPa              |
| Coefficiente di diffusione in aria |        |                           |
|                                    | a 0°C  | 0,1420 cm <sup>2</sup> /s |
|                                    | a 40°C | 0,1772 cm <sup>2</sup> /s |

### 1.2.1 Stati della materia e diagramma di fase

Uno degli aspetti più rilevanti della CO<sub>2</sub> per la valutazione dei rischi è la varietà di stati fisici che può assumere in funzione della temperatura e della pressione. Il diagramma di fase (Figura 1) rappresenta le regioni di stabilità delle diverse fasi (solido, liquido, gas) e i confini di coesistenza, cioè le curve di pressione e temperatura lungo le quali due fasi possono esistere in equilibrio.

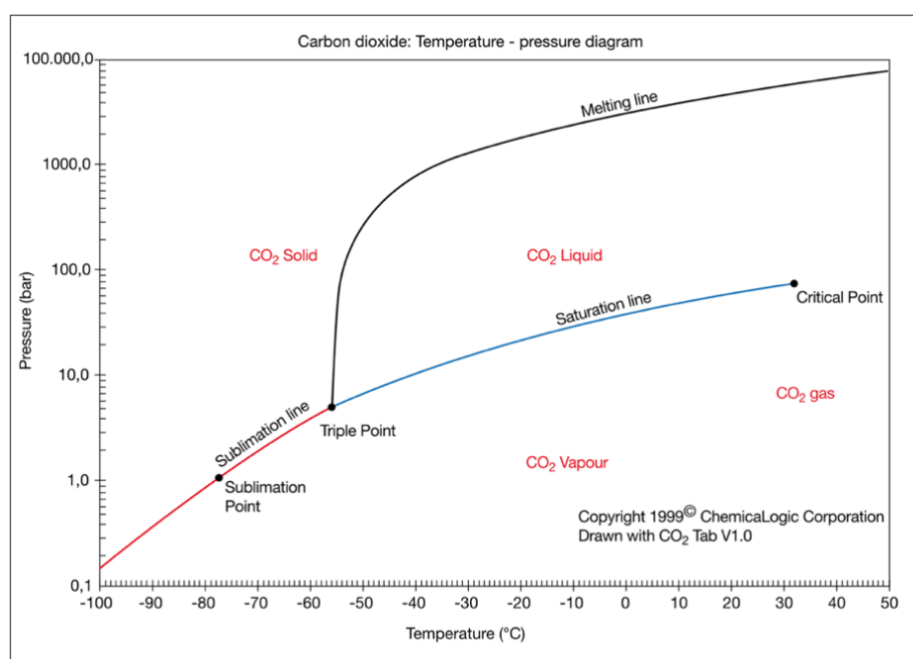


Figura 1 - Diagramma di fase dell'anidride carbonica (CO<sub>2</sub>) [7]

Nel caso della CO<sub>2</sub>, il punto triplo riveste un ruolo fondamentale: si trova, come visto in Tabella 1, a -56,6 °C e 5,18 bar e rappresenta la condizione di coesistenza di tutte e tre le fasi (solido, liquido e gas). A pressioni inferiori a questa, la fase liquida non è

termodinamicamente stabile: a pressione atmosferica (1 bar) l'anidride carbonica può esistere solo come gas o come solido. Il solido sublima direttamente a  $-78,5\text{ }^{\circ}\text{C}$  senza passare dallo stato liquido.

L'anidride carbonica liquida può esistere solo sopra il punto triplo. Oltre questi valori, è possibile la comparsa di tutte e tre le fasi (gas, liquido e solido). Sopra il punto critico, situato a  $31,1\text{ }^{\circ}\text{C}$  e 73,9 bar, la sostanza entra nello stato supercritico, caratterizzato da proprietà intermedie tra quelle dei liquidi e dei gas. La  $\text{CO}_2$  supercritica ha densità simile a quella di un liquido e viscosità simile a quella di un gas, proprietà che la rendono ideale come solvente ecocompatibile in numerosi processi industriali, tra cui processi di cattura e stoccaggio della  $\text{CO}_2$  (CCS). [8]

### 1.3 Rilascio di $\text{CO}_2$

Quando si decide di trasportare, stoccare o semplicemente gestire  $\text{CO}_2$  in un impianto occorre avere ben chiaro che il rilascio incidentale, per guasto, discontinuità o guasto esterno, non è un semplice rilascio di gas ideale: esso può comportare transizioni di fase, raffreddamenti rapidi, variazioni di densità e viscosità, nonché effetti criogenici e fenomeni di instabilità.

La  $\text{CO}_2$  può essere stoccata in diverse fasi e questo determina una dinamica di rilascio differente:

- Rilascio da fase gassosa: in questo caso l'espansione è rapida e avviene per lo più in condizioni quasi adiabatiche. Ciò determina un abbassamento brusco della temperatura, guidato dal coefficiente di Joule-Thomson (1.3.1), producendo un raffreddamento significativo. Tale raffreddamento può essere sufficiente a portare il gas verso condizioni di condensazione del vapore acqueo circostante, innescando la formazione di goccioline liquide e trasformando il getto in una miscela bifase. Questo fenomeno, oltre a complicare i modelli di dispersione atmosferica, aumenta i rischi criogenici locali, con possibili effetti dannosi per materiali e tessuti biologici. Studi recenti hanno evidenziato che la temperatura del getto può scendere di decine di gradi nei primi metri di espansione, mettendo in crisi le assunzioni semplificative di isothermicità. [9]

- Rilascio da fase liquida: questo rilascio comporta una fenomenologia più complessa. Perché la CO<sub>2</sub> si trovi effettivamente in fase liquida, non è sufficiente che sia raffreddata: è necessario che essa si trovi anche a una pressione superiore a quella ambiente. Durante il rilascio, la rapida depressurizzazione innesca evaporazione istantanea, raffreddamento intenso e formazione di ghiaccio secco. La caduta di pressione porta infatti a una forte espansione isoentalpica governata dall'effetto Joule-Thomson, con temperature che precipitano fino a circa -78,5°C, valore prossimo al punto di sublimazione a pressione atmosferica della CO<sub>2</sub>. In queste condizioni, parte della CO<sub>2</sub> vaporizza e parte si deposita in particelle solide, generando un getto bifase gas-solido.

Questo getto, estremamente freddo e denso, prolunga gli effetti criogenici e può causare danni ai materiali esposti e a persone che si trovano nelle zone limitrofe a causa delle particelle solide che si comportano come proiettili. La nube fredda che si forma tende ad accumularsi al suolo, amplificando i rischi di asfissia e congelamento locale. [9]

- Particolare attenzione merita il rilascio di CO<sub>2</sub> supercritica, condizione operativa tipica dei sistemi di trasporto e stoccaggio geologico. In fase supercritica, la sostanza non ha una netta distinzione tra liquido e gas, ma possiede densità elevate e compressibilità sensibile. Durante un rilascio, la rapida caduta di pressione porta il fluido ad attraversare la regione critica e a transitare nel dominio gassoso, con raffreddamenti molto pronunciati dovuti all'effetto Joule-Thomson. Questo raffreddamento, più marcato che negli altri scenari, può innescare localmente condizioni tali da riportare parte del fluido nel dominio liquido o addirittura solido. L'espansione della CO<sub>2</sub> supercritica è quindi un fenomeno fortemente non lineare, dove le proprietà fisico-chimiche cambiano radicalmente lungo il getto. [9]

### 1.3.1 Effetto di Joule – Thomson

L'elemento unificante dei diversi scenari è l'effetto di Joule-Thomson. Questo effetto consiste nella variazione di temperatura che un gas reale subisce durante un'espansione attraverso una strozzatura, senza scambi di calore con l'esterno. Mentre per un gas ideale

la temperatura non cambierebbe, per un gas reale l'espansione comporta in genere un marcato raffreddamento, tanto che in condizioni opportune, nel caso di anidride carbonica, può formarsi ghiaccio secco e nebbie visibili.

Il parametro che governa questo comportamento è il coefficiente di Joule-Thomson ( $\mu_{JT}$ ), definito come la variazione di temperatura rispetto alla pressione a entalpia costante. Quando  $\mu_{JT}$  è positivo, l'espansione determina raffreddamento; quando  $\mu_{JT}$  è negativo, l'espansione porta a riscaldamento. La temperatura di inversione dell'effetto Joule – Thomson per l'anidride carbonica è molto elevata, circa 1500 K a 1 atm, il che significa che in quasi tutte le condizioni pratiche l'espansione causa raffreddamento. [10]

Al di sotto della campana nel diagramma p-T, il coefficiente di Joule-Thomson assume valori positivi, mentre al di sopra risulta negativo. Come mostrato in Figura 2, i simboli corrispondono ai dati sperimentali: triangoli, quadrati e cerchi sono i risultati di Price. La linea tratto-punto rappresenta la previsione dell'equazione di stato di Peng e Robinson, la linea continua è la previsione dell'equazione di stato di Pitzer e Sterner, la linea tratteggiata è la previsione dell'equazione di stato di Span e Wagner. I cerchi pieni rappresentano i risultati delle simulazioni Monte Carlo. [11]

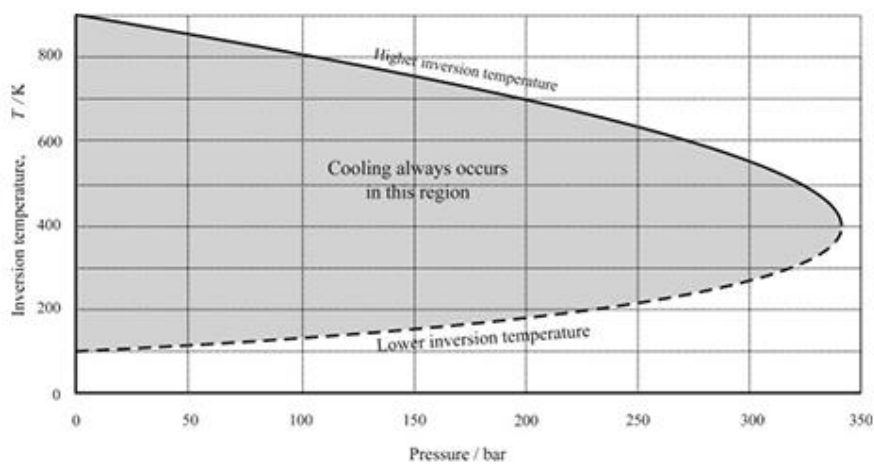


Figura 2 - Curva di inversione JT per la CO<sub>2</sub>

Dal punto di vista pratico, questo fenomeno ha conseguenze importanti: nei rilasci incidentali da serbatoi o condotte di pressione, l'espansione improvvisa porta a un forte abbassamento termico, con formazione di ghiaccio o di condensati che possono alterare la dinamica del rilascio e generare nubi dense e fredde.

Il quadro che emerge è quello di una sostanza che, pur non essendo infiammabile o esplosiva, manifesta comportamenti di rilascio complessi e talvolta controintuitivi. La capacità della CO<sub>2</sub> di raffreddarsi intensamente, di generare miscele bifase e di accumularsi in zone basse e poco ventilate impone l'adozione di modelli avanzati per la valutazione del rischio.

Comprendere le dinamiche di rilascio della CO<sub>2</sub> significa riconoscere che ogni scenario comporta trasformazioni complesse e condizioni estreme capace di generare conseguenze dirette sulla salute umana e sull'integrità delle strutture. È dunque necessario spostare l'attenzione sui principali pericoli associati all'esposizione delle persone: tossicità, asfissia ed effetti criogenici.

## 1.4 Le proprietà tossicologiche della CO<sub>2</sub>

L'anidride carbonica non è classificata come gas tossico [12], non è infiammabile né corrosiva quando si presenta come composto chimico puro, ma rappresenta un pericolo serio in caso di rilascio in ambienti confinati. È innocua a concentrazioni naturali, ma diventa tossica quando la concentrazione aumenta, con effetti che vanno oltre la semplice riduzione di ossigeno. Le sue proprietà (inodore, incolore, densità quasi doppia a quella dell'aria) favoriscono l'accumulo in zone basse e poco ventilate senza segnali percepibili. Dal punto di vista tossicologico, agisce sia come gas asfissiante (causando ipossia) sia interferendo direttamente con i processi fisiologici, provocando acidosi respiratoria (1.4.1). Gli effetti vanno da sintomi lievi (cefalea, vertigini, dispnea) fino a perdita di coscienza, convulsioni e morte rapida.

Alla luce di queste considerazioni, la valutazione dei rischi associati a rilasci incidentali di CO<sub>2</sub> non può limitarsi alla sola natura asfissiante del gas, ma deve tenere conto anche dei suoi effetti tossicologici specifici e delle condizioni ambientali che ne influenzano la dispersione e l'accumulo.

#### 1.4.1 Meccanismi tossicologici ed effetti dell'esposizione acuta

Il primo meccanismo è legato alla sua elevata solubilità nei fluidi corporei, circa venti volte superiore a quella dell'ossigeno, che consente un rapido trasferimento della molecola dall'ambiente esterno al sangue e ai tessuti. L'aumento della pressione parziale di CO<sub>2</sub> nel sangue (PaCO<sub>2</sub>) stimola la formazione di acido carbonico, che a sua volta si dissocia in bicarbonato e ioni di idrogeno, determinando un abbassamento del pH ematico. Questo fenomeno, noto come acidosi respiratoria, rappresenta il principale effetto tossicologico diretto della CO<sub>2</sub> e si manifesta già a concentrazioni ambientali relativamente contenute, comprese fra l'1% e il 2% in volume. In queste condizioni sono stati osservati incrementi significativi della ventilazione polmonare e riduzioni del pH arterioso. [13]

L'organismo risponde inizialmente con una stimolazione del centro respiratorio che induce iperventilazione, nel tentativo di espellere la CO<sub>2</sub> in eccesso e ristabilire l'equilibrio acido-base. Questo meccanismo, tuttavia, comporta anche un aumento della frequenza cardiaca e della pressione arteriosa, con un conseguente sovraccarico del sistema cardiovascolare. Già in concentrazioni prossime al 5% si osservano sintomi quali cefalea, vertigini, sudorazione, accelerazione del battito cardiaco e difficoltà respiratorie. [14]

Quando la concentrazione di CO<sub>2</sub> supera il 7-10%, i meccanismi di compensazione risultano rapidamente inefficaci. L'acidosi marcata e l'ipossia portano a compromissione delle funzioni cerebrali, con insorgenza di confusione mentale, perdita di coscienza e convulsioni. Se i livelli si avvicinano al 15% o oltre, possono insorgere coma e morte in pochi minuti [15]. In questi scenari, la tossicità della CO<sub>2</sub> non si riduce a un semplice effetto asfissiante, ma si configura come un insieme di alterazioni metaboliche e neurologiche di rapida insorgenza.

Vengono riportate schematizzate in Tabella 2 le soglie appena descritte.

Tabella 2 - Effetti acuti sulla salute delle alte concentrazioni di CO<sub>2</sub> [15]

| Concentrazione di CO <sub>2</sub><br>in aria [% v/v] | Esposizione                     | Effetti sull'uomo                                                                                         |
|------------------------------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 17 – 30                                              | Entro un<br>minuto              | Perdita di attività controllata e intenzionale, perdita di coscienza, convulsioni, coma, morte            |
| 10 – 15                                              | Da 1 minuto a<br>diversi minuti | Vertigini, sonnolenza, forti spasmi muscolari, perdita di coscienza                                       |
| 7 – 10                                               | Pochi minuti                    | Incoscienza, quasi incoscienza                                                                            |
|                                                      | Da 1,5 minuti<br>a 1 ora        | Mal di testa, aumento della frequenza cardiaca, respiro corto, vertigini, sudorazione, respiro accelerato |
| 6                                                    | 1-2 minuti                      | Disturbi dell'udito e della vista                                                                         |
|                                                      | ≤ 16 minuti                     | Mal di testa, difficoltà respiratorie (dispnea)                                                           |
|                                                      | Diverse ore                     | Tremori                                                                                                   |
| 4 – 5                                                | Entro pochi<br>minuti           | Mal di testa, vertigini, aumento della pressione sanguigna, respiro difficoltoso                          |
| 3                                                    | 1 ora                           | Lieve mal di testa, sudorazione e difficoltà respiratorie a riposo                                        |
| 2                                                    | Diverse ore                     | Mal di testa, difficoltà respiratorie dopo uno sforzo lieve                                               |

#### 1.4.2 Effetti dell'esposizione cronica

Diversa è la condizione in esposizioni croniche a concentrazioni moderate, comprese tra il 2 e il 3% in volume. Studi sperimentali condotti su volontari hanno mostrato che l'organismo può sviluppare un certo grado di adattamento, con un progressivo aumento della ventilazione sia a riposo sia durante sforzi moderati, senza manifestare effetti acuti gravi nelle prime settimane di esposizione. Tuttavia, la persistenza di uno stato di acidosi comporta un carico metabolico significativo che può influenzare negativamente la funzionalità respiratoria e cardiovascolare a lungo termine. [16]

### 1.4.3 Limiti normativi di esposizione

Nella valutazione del rischio associato all'anidride carbonica, come per qualunque prodotto tossico e nocivo, non conta solo la concentrazione, ma anche la durata dell'esposizione, ossia la dose accumulata. Per questo motivo le autorità competenti fissano degli *Occupational Exposure Limits* (OELs), che definiscono le concentrazioni massime ammissibili nell'aria dei luoghi di lavoro. In genere gli OELs sono calcolati come media ponderata su otto ore (es. TWA-8h), corrispondente a un turno lavorativo standard, e sono calcolati sul presupposto che un lavoratore adulto sano possa essere esposto per una vita lavorativa di circa 40 anni. Quando la giornata lavorativa supera le 8 ore previste, i valori limite devono essere proporzionalmente abbassati.

Oltre agli OELs a lungo termine, esistono i limiti di esposizione a breve termine (STEL, *Short-Term Exposure Limits*), che si riferiscono a periodi di 15 minuti, pensati per prevenire effetti acuti dovuti a concentrazioni elevate. In alcuni casi esistono inoltre dei valori “*ceiling*” soglie che non devono mai essere superate, poiché oltre tali valori la tossicità della CO<sub>2</sub> diventa rapida e potenzialmente letale. [15]

Un'ulteriore parametro di riferimento è l>IDHL (*Immediately Dangerous to Life or Health*), definito dal NIOSH come la concentrazione di un sostanza che può causare effetti irreversibili sulla salute o la morte in meno di 30 minuti in caso di esposizione senza dispositivi di protezione. Per la CO<sub>2</sub>, il valore IDHL è pari a 40.000 ppm (4% v/v), indicando che concentrazioni superiori rappresentano un rischio immediato per la vita o la salute. [17]

Una volta identificati gli effetti della concentrazione CO<sub>2</sub> inalata, è necessario stimare anche le probabilità di esito letale, come indica il *UK Health and Safety Executive* (HSE), attraverso il documento NORSOK Z013, che definisce limiti teorici basati su concentrazione e durata di esposizione [18]:

- 100000 ppm (10% v/v) per oltre 30 minuti;
- 120000 ppm (12% v/v) per intervalli di 5 – 10 minuti;
- 150000 ppm (15% v/v) per meno di 5 minuti.

Nella Tabella 3 vengono riportati i limiti di esposizione definiti da normative.

Tabella 3 - Limiti di esposizione [15]

| Tempo di esposizione | % CO <sub>2</sub> | Commento                                                                              | Riferimento                                             |
|----------------------|-------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| 10 ore               | 0,50%             | Media ponderata nel tempo                                                             | NIOSH (US)                                              |
| 7 ore                | 0,50%             | Limite di esposizione: professionale a lungo termine medio ponderato nel tempo (LTEL) | OSHA (US) COSHH HSE (UK)                                |
| 60 minuti            | 4%                | Livello di esposizione di emergenza per operazioni sottomarine                        | US Navy                                                 |
|                      | 2,5%              | Livello di esposizione di emergenza per operazioni sottomarine                        | National (US) Research Council                          |
|                      | 5%                | Limite di esposizione alla sopravvivenza a lungo termine suggerito                    | HSE (UK)                                                |
|                      | 2%                | Limite massimo di esposizione                                                         | Compressed Gas Association 1990                         |
| 20 minuti            | 3%                | Limite massimo di esposizione                                                         | Compressed Gas Association 1990                         |
| 15 minuti            | 1,5%              | Limite di esposizione professionale a breve termine (STEL)                            | COSHH HSE (UK)                                          |
|                      | 3%                | Limite di esposizione a breve termine (STEL)                                          | Federal occupational safety and health regulations (US) |
| 10 minuti            | 3%                | Limite di esposizione a breve termine raccomandato (STEL)                             | NIOSH (US)                                              |
|                      | 4%                | Limite massimo di esposizione                                                         | Compressed Gas Association 1990                         |
| 7 minuti             | 5%                | Limite massimo di esposizione                                                         | Compressed Gas Association 1990                         |
| 5 minuti             | 5%                | Limite di esposizione a breve termine suggerito (STEL)                                | HSE (UK)                                                |
|                      | 6%                | Limite massimo di esposizione                                                         | Compressed Gas Association 1990                         |
| 3 minuti             | 7%                | Limite massimo di esposizione                                                         | Compressed Gas Association 1990                         |
| 1 minuto             | 15%               | Limite di esposizione                                                                 | NORSOK (Norway)                                         |
| < 1 minuto           | 4%                | Limite massimo di esposizione professionale                                           | Federal occupational safety and health regulations (US) |

## 1.5 Effetti criogenici

Avendo trattato le proprietà tossicologiche si può rilevare come sia di facile accesso uno schema tabellare che identifichi il rapporto causa-effetto tra le concentrazioni di CO<sub>2</sub> nell'aria e il tempo d'esposizione e le conseguenze sull'organismo umano. Una descrizione altrettanto chiara non può essere fatta per le conseguenze di dinamiche criogeniche.

Un rilascio massivo di CO<sub>2</sub> può infatti generare un pennacchio criogenico<sup>1</sup>, caratterizzato da un getto freddo e denso, misto di gas e particelle solide di ghiaccio secco. Il pennacchio criogenico tende progressivamente a riscaldarsi con l'interazione con l'aria circostante, ma nelle immediate vicinanze della sorgente si mantengono condizioni estreme di freddo, in grado di costituire una minaccia sia per le persone che per le strutture. Inoltre, la formazione di banchi di ghiaccio secco a seguito della deposizione delle particelle solide può prolungare nel tempo la presenza di un ambiente freddo e pericoloso, anche per diverse ore in condizioni di scarsa ventilazione. [19]

### 1.5.1 Effetti criogenici sull'uomo

L'esposizione dell'uomo alle condizioni criogeniche rappresenta un rischio rilevante. La rapida espansione del gas può raffreddare l'aria fino a -40/-70°C fino a lunghe distanze, causando danni respiratori immediati, soprattutto in ambienti chiusi. Tra gli effetti principali vi è l'ipotermia, definita come l'abbassamento della temperatura corporea centrale sotto i 35°C. Essa si manifesta inizialmente con tremori, tachicardia e dolori muscolari (ipotermia lieve fino a 32°C), fino a giungere, nei casi più gravi, a perdita di coscienza e morte per arresto cardiaco quando la temperatura scende sotto i 26°C [20]. Gli studi evidenziano che un'esposizione di soli 10 minuti a -34°C può essere sufficiente a innescare ipotermia, mentre a -40/-45°C bastano solo 5-7 minuti per lo stesso effetto [21]. Questo dato è particolarmente interessante perché introduce una dimensione temporale precisa al rischio: non solo la temperatura assoluta, ma anche la durata

---

<sup>1</sup> Viene definita "pennacchio" (*plume*) una nube dalla forma allungata derivante da un rilascio di gas o aerosol in atmosfera a velocità pressoché costante. L'origine del pennacchio risiede in una sorgente continua e localizzata di materiale, che si disperde progressivamente nell'ambiente circostante.

dell'esposizione diventa un fattore critico, rendendo difficile stabilire soglie di sicurezza generalizzabili.

Un altro fenomeno documentato è il cosiddetto “*cold shock*”, cioè il brusco raffreddamento cutaneo che induce iperventilazione, aritmie e, nei soggetti vulnerabili, arresto cardiaco, aggravato dall'effetto asfissiante e neurotossico della CO<sub>2</sub>. A ciò si aggiungono danni locali: il congelamento cutaneo (*frostbite*) si verifica già a temperature intorno a -15°C, ma a -26°C, soprattutto in condizioni di vento forte, le lesioni possono insorgere in appena cinque minuti. Le conseguenze vanno dalla necrosi cellulare alla cancrena, con necessità di amputazione. [19]

Un aspetto di notevole rilievo, come già anticipato, riguarda l'interazione con particelle solide di CO<sub>2</sub>. Durante il rilascio, infatti, possono formarsi cristalli o frammenti di ghiaccio secco che, impattando con il corpo, generano lesioni traumatiche o vere e proprie ustioni criogeniche. Durante un rilascio di CO<sub>2</sub>, l'aria circostante può raggiungere temperature di circa -80°C, condizioni in cui, prima che gli organi vitali delle persone esposte si raffreddino, non solo si manifestano reazioni cardiache da “*cold shock*”, ma anche pelle, tessuti e soprattutto occhi possono subire danni diretti a contatto con l'aria fredda. [22]

Le particelle di massa superiore a 0,1 kg (*debris*) possono comportarsi come detriti, causando fratture ossee o danni compressivi agli organi interni, mentre quelle più piccole (*fragments*) possono penetrare i tessuti e determinare lesioni profonde. Questo aspetto è cruciale perché lega due ordini di rischio: quello criogenico legato alle basse temperature e quello meccanico, simile a quello da proiettili o schegge.

La formazione della fase solida deve essere considerata soprattutto in caso di rilasci incidentali rilevanti. Le particelle di ghiaccio secco presenti nel getto possono inoltre accumularsi a terra formando banchi che sublimano lentamente, esponendo le persone a concentrazioni pericolose di anidride carbonica anche dopo l'evento iniziale [23]. Dopo la deposizione, il banco di ghiaccio secco agisce come sorgente di emissione ritardata, generando una concentrazione localizzata di CO<sub>2</sub> per un luogo (Figura 3). In questo modo, dopo la rottura si ottengono due sorgenti principali: la prima, associata alla depressurizzazione dell'inventario, prevale durante il rilascio; la seconda, derivante dalla sublimazione del banco, prevale per ore dopo la perdita. [23]

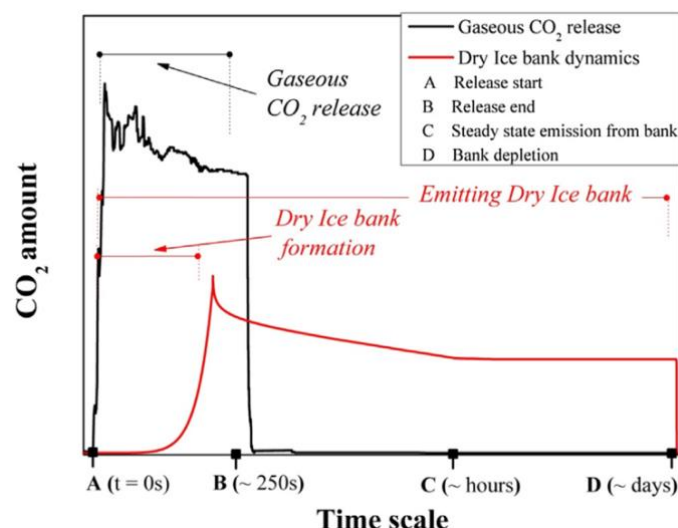


Figura 3 - Dinamica del rilascio di CO<sub>2</sub> pressurizzata e della sublimazione delle banche con riferimento a una scala temporale generale. [21]

Questi dati sui rischi diretti si intrecciano con il dibattito più ampio sulle tecnologie criogeniche applicate alla cattura della CO<sub>2</sub>. L'impiego di sistemi di separazione e liquefazione criogenica della CO<sub>2</sub> è considerato una via promettente per ridurre le emissioni globali. Tuttavia, la gestione dei rischi associati a perdite o rilasci incidentali pongono problemi di sicurezza ancora non completamente normati o standardizzati.

### 1.5.2 Effetti criogenici sulle strutture

Le strutture ingegneristiche sono progettate per resistere a carichi meccanici complessi tenendo conto di fattori ambientali spesso estremi. La temperatura rappresenta una delle variabili critiche: mentre il comportamento dei materiali a temperatura ambiente è relativamente ben noto e governato da decenni di normative, l'esposizione a condizioni criogeniche introduce una sfida radicalmente diversa. Le strutture non sono soltanto sottoposte a raffreddamenti intensi, ma anche a gradienti termici rapidi e localizzati, capaci di generare stress transitori che si sommano o addirittura prevalgono sui carichi meccanici esterni.

Tra i materiali metallici impiegati nelle strutture, gli acciai occupano una posizione centrale per diffusione, economicità a versatilità. Tuttavia, proprio gli acciai rappresentano il caso paradigmatico delle difficoltà poste dal freddo estremo. Le loro proprietà meccaniche non evolvono in modo lineare con la temperatura: al contrario,

molti acciai a struttura ferritica o bainitica subiscono una brusca transizione duttile-fragile (*ductil-to-brittle transition*, DBT), fenomeno per cui, al di sotto di una certa temperatura di riferimento, il materiale perde gran parte delle sue capacità di deformarsi plasticamente e frattura per scissione intergranulare. Questa temperatura di transizione, nota come DBTT, varia sensibilmente con la lega, il trattamento termico e la microstruttura, ma in diversi acciai strutturali non ottimizzati può collocarsi già intorno a poche decine di gradi sotto lo zero, rendendo rischioso l'impiego senza opportune precauzioni. [24]

Come si vede in Figura 4, l'*upper shelf* è l'intervallo di temperatura in cui la superficie del campione di CVN mostra un aspetto indicativo di una frattura duttile al 100%. L'intervallo di temperatura in cui il campione ha una bassa energia d'impatto all'intaglio e mostra fragilità è definito *lower shelf*. La zona di transizione è caratterizzata da valori di energia assorbita diffusa.

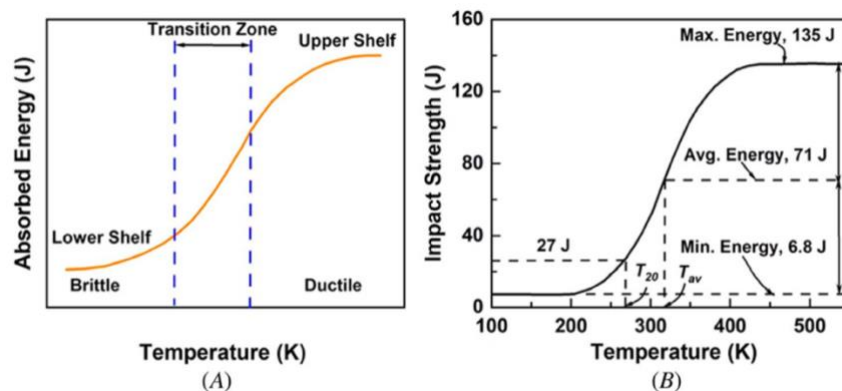


Figura 4 - (A) Schema del DBT e (B) vari metodi per rappresentare il DBT in un grafico dell'energia d'impatto in funzione della temperatura. [24]

## 1.6 Criteri di vulnerabilità per la valutazione del rischio

Dopo aver descritto i meccanismi tossicologici della CO<sub>2</sub> e gli effetti criogenici su persone e strutture, è necessario definire i criteri attraverso cui tali fenomeni vengono tradotti in termini quantitativi di danno.

La sola descrizione fisica del rilascio non è infatti sufficiente per una valutazione del rischio: grandezze come concentrazione, temperatura o durata dell'esposizione devono essere convertite in indicatori oggettivi di vulnerabilità, esprimibili in termini di probabilità di lesione, letalità o perdita di funzionalità.

I criteri di vulnerabilità rappresentano quindi il passaggio metodologico tra la modellazione del fenomeno e la stima delle conseguenze sugli elementi esposti. Nel caso della CO<sub>2</sub>, tali criteri devono considerare sia gli effetti sull'uomo, legati ad asfissia, tossicità e condizioni criogeniche, sia i possibili danni alle strutture e alle apparecchiature.

Nei paragrafi seguenti vengono quindi presentati i principali modelli e criteri adottati in letteratura per la valutazione quantitativa del danno, distinguendo tra vulnerabilità umana e vulnerabilità strutturale.

### 1.6.1 Criteri di vulnerabilità per l'uomo

La vulnerabilità dell'uomo in caso di rilascio incidentale di CO<sub>2</sub> è il risultato dell'interazione di più meccanismi di danno: asfissia e tossicità acuta, ustioni criogeniche e inalazione o impatto di particelle solide di ghiaccio secco. La valutazione quantitativa del rischio richiede pertanto l'adozione di modelli in grado di correlare l'intensità dell'esposizione alla probabilità di danno.

#### Asfissia e tossicità: modelli dose-risposta

I limiti normativi di esposizione (OEL, STEL, IDHL) definiscono concentrazioni soglia associate a determinati intervalli temporali, ma rappresentano valori discreti che non consentono di descrivere la gradualità dell'effetto né la variabilità individuale.

Per superare tale limite concettuale, diverse agenzie europee, tra cui il RIVM (*Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu*) [25] e il DBS (*Directorate for Civil Protection and Emergency Planning*) [26] norvegese, hanno introdotto l'uso delle funzioni Probit.

Queste relazioni permettono di stimare in modo continuo la probabilità di letalità in funzione della concentrazione e del tempo di esposizione, secondo la forma generale:

$$Pr = a + b \cdot \ln(C^n t)$$

Dove C è la concentrazione del gas (in ppm), t è il tempo di esposizione in minuti, Pr è il valore probit correlato alla probabilità di effetto attraverso la funzione cumulativa normale.

Per la CO<sub>2</sub>, il RIVM e il DBS propongono la relazione:

$$Pr = -90,8 + 1,01 \cdot \ln (C^8 t)$$

Valida per concentrazioni superiori al 5% in vol, che consente di rappresentare in modo realistico l'effetto asfissiante acuto. Questa formulazione è coerente con i limiti teorici del documento NORSOK Z-013, che individuano intervalli di letalità a 10-15% vol per esposizioni inferiori a 5 minuti.

I valori della funzione Probit vengono poi tradotti in probabilità di letalità secondo la relazione:

$$P = \frac{1}{2} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{Y - 5}{\sqrt{2}} \right) \right]$$

I valori  $Y=2,67$ ,  $5$  e  $8,06$  corrispondono rispettivamente all'1%, 50% e 99% di letalità. Gli  $LC_x$  rappresentano quindi le concentrazioni critiche in grado di indurre una frazione  $x\%$  di decessi nella popolazione esposta. Queste curve costituiscono un passaggio intermedio fondamentale tra le concentrazioni simulate e le probabilità di danno, fornendo un criterio oggettivo per la definizione delle soglie di vulnerabilità.

L'introduzione delle funzioni Probit consente quindi di collegare i risultati delle simulazioni fluidodinamiche (CFD) alle mappe di vulnerabilità per l'uomo, traducendo grandezze fisiche in indicatori di rischio quantitativo.

Un approccio alternativo è rappresentato dal modello di *toxic load* dell'HSE [27] che fornisce una formulazione quantitativa che consente di rendere operativa la dipendenza congiunta da concentrazione e tempo di esposizione. Il concetto di *Dangerous Toxic Load* (DTL) si basa infatti sull'integrazione nel tempo della concentrazione inalata, permettendo di superare l'uso di soglie istantanee e di descrivere in modo più realistico la vulnerabilità in scenari caratterizzati da esposizioni transitorie e non uniformi.

Per la CO<sub>2</sub>, l'HSE esprime i livelli SLOT e SLOD mediante una relazione del tipo:

$$C^n \cdot t = DTL$$

Dove  $C$  rappresenta la concentrazione di CO<sub>2</sub> in aria (ppm),  $t$  il tempo di esposizione (min) e  $n$  l'esponente di *Ten Berge*, pari a 8 per la CO<sub>2</sub>. Sulla base delle correlazioni adottate dall'HSE, i valori di riferimento risultano:

$$SLOT = C^8 \cdot t = 1,5 \cdot 10^{40}$$

$$SLOD = C^8 \cdot t = 1,5 \cdot 10^{41}$$

Il livello SLOT (*Specified Level of Toxicity*) è associato a una condizione di bassa probabilità di morte (circa 1% di letalità), mentre il livello SLOD (*Significant Likelihood Of Death*) corrisponde ad una probabilità di morte del 50%. L'intervallo compreso tra i due livelli rappresenta una zona di danno severo, in cui gli individui esposti possono subire effetti gravi o perdere la capacità di allontanarsi autonomamente dall'area del rilascio.

Rispetto alle soglie normative discrete, l'impiego di funzioni Probit e del modello di *toxic load* consente una rappresentazione più realistica e continua della vulnerabilità umana.

### Effetti criogenici

Le linee guida IOGP (*International Association of Oil and Gas Producers*) trattano le esposizioni criogeniche facendo riferimento principalmente a sostanze come l'LNG o altri gas liquefatti, individuando due meccanismi principali di danno per le persone: l'asfissia dovuta alla deplezione dell'ossigeno a seguito della rapida vaporizzazione del liquido e delle ustioni da freddo causate dal contatto diretto con liquidi o vapori a bassissime temperature. L'approccio proposto, in Figura 5, si fonda sulla correlazione tra la probabilità di letalità e temperatura derivanti dal rilascio. [12]

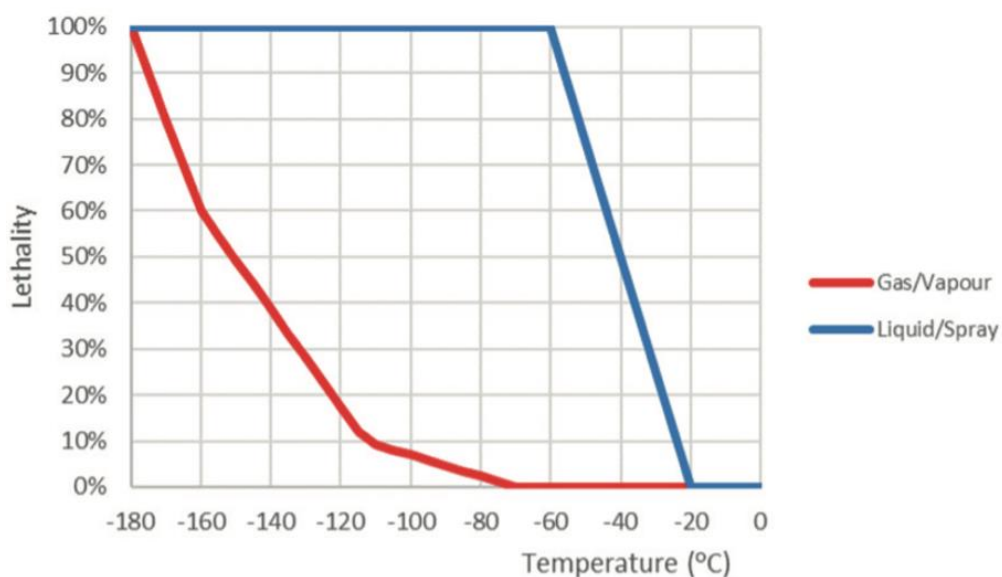


Figura 5 - Letalità del personale all'aperto per liquidi/spruzzi criogenici e gas/vapori [12]

Questo tipo di semplificazione consente di avere uno strumento immediato di screening, utile soprattutto in fase preliminare di valutazione del rischio. Le curve proposte dalle linee guida IOGP correlano infatti la temperatura del rilascio alla probabilità di morte, distinguendo tra esposizione a liquidi e vapori criogenici.

Tuttavia, un approccio di questo tipo risulta fortemente semplificato nel caso dell'anidride carbonica. Le curve IOGP sono state sviluppate principalmente con riferimento a sostanze quali l'LNG e non tengono conto delle caratteristiche della CO<sub>2</sub>, in particolare delle rapide transizioni di fase e della formazione di ghiaccio secco durante l'espansione.

Nel caso della CO<sub>2</sub>, la presenza di una fase solida introduce meccanismi di danno aggiuntivi, quali la proiezione di frammenti e la sublimazione progressiva delle particelle, che possono prolungare nel tempo gli effetti termici e asfissianti. L'applicazione diretta delle curve IOGP rischia pertanto di sottovalutare scenari reali di esposizione, soprattutto in prossimità della sorgente.

Per superare tali limitazioni, la letteratura più recente propone criteri di valutazione più articolati, capaci di rappresentare in modo più realistico la natura multifase del rilascio. Un contributo rilevante in questa direzione è offerto dallo studio di *Lou, et al. (2024)* [28], che evidenzia come la formazione e la sublimazione del ghiaccio secco influenzino significativamente sia l'estensione delle zone vicine al rilascio sia le zone limitrofe.

In particolare, per la valutazione delle ustioni criogeniche viene introdotto il concetto di *wind chill temperature*, che combina la temperatura del pennacchio con la velocità del flusso e consente di stimare il rischio di lesioni cutanee. La *wind chill temperature* è determinata dalla seguente formula:

$$T_{wc} = 13,12 + 0,6215 \cdot T_3 - 12,13 \cdot u_3^{0,16} + 0,4231 \cdot T_3 \cdot u_3^{0,16}$$

Dove T<sub>3</sub> è la temperatura del getto di CO<sub>2</sub> e u<sub>3</sub> è la velocità del getto.

La Tabella 4 traduce questo concetto in una classificazione del pericolo che va da condizioni di semplice disagio fino a scenari estremi in cui la pelle esposta può congelare in meno di due minuti. Per l'inalazione delle particelle solide, invece, la distanza di pericolo è definita come il punto in cui la portata residua di ghiaccio secco scende al di sotto della soglia di 0,01 kg/s, criterio che permette di legare la valutazione direttamente alla dinamica di sublimazione del materiale.

Tabella 4 - Temperatura di raffreddamento del vento e tempo di congelamento della pelle esposta [28]

| Classificazione del rischio | T <sub>we</sub> (°C) | Effetto                                                            |
|-----------------------------|----------------------|--------------------------------------------------------------------|
| 1                           | -10 / -24            | Freddo sgradevole                                                  |
| 2                           | -25 / -34            | Molto freddo, rischio di congelamento della pelle                  |
| 3                           | -35 / -59            | Freddo intenso, la pelle esposta può congelare entro 10 minuti     |
| 4                           | -60 / colder         | Estremamente freddo, la pelle esposta può congelare entro 2 minuti |

Tale approccio consente di superare la semplice correlazione temperatura-letalità, introducendo una dimensione temporale coerente con la dinamica dell'esposizione.

Per quanto riguarda le particelle solide, la vulnerabilità può essere stimata attraverso correlazioni di tipo Probit che mettono in relazione massa e velocità d'impatto con la probabilità di lesione grave.

La probabilità di lesioni dovute all'impatto delle particelle può essere quantificata mediante funzioni *probit*, che permettono di stimare il rischio di lesioni gravi o letali in funzione della massa delle particelle e della velocità d'impatto. Seguendo le correlazioni proposte da TNO [29], si ottengono le seguenti relazioni:

- Per particelle con massa superiore a 4,5 kg:

$$Pr = -13,19 + 10,54 \cdot \ln(v_0)$$

- Per particelle con massa tra 0,1 kg e 4,5 kg:

$$Pr = -17,56 + 5,3 \cdot \ln\left(\frac{1}{2} \cdot m \cdot v_0^2\right)$$

- Per particelle con massa tra 0,001 kg e 0,1 kg (criterio di penetrazione dei frammenti):

$$Pr = 38,83 - 2,08 \cdot \ln(m \cdot v_0^{5,115})$$

Queste funzioni permettono di modellare il rischio meccanico in modo quantitativo, integrando le considerazioni già espresse sui dati criogenici.

### 1.6.2 Criteri di vulnerabilità per le strutture

In alcuni acciai *dual-phase* o a bassa lega, la DBTT si trova tra -50 e -120°C, mentre leghe arricchite in nichel o acciai inox austenitici mantengono una buona tenacità anche a 77 K, la temperatura tipica dell'azoto liquido. In queste condizioni, la resistenza meccanica tende paradossalmente ad aumentare, ma la capacità di assorbire energia in frattura diminuisce, accentuando il rischio di rottura catastrofica. Per caratterizzare in modo sistematico questo comportamento si ricorre alle prove Charpy a diverse temperature e all'approccio della *Master Curve* (ASTM E1921), che consente di definire una temperatura di riferimento rappresentativa del comportamento a frattura fragile. [24]

La Figura 6 mostra come la variazione della tenacità alla frattura di diversi metalli a basse temperature sia influenzata dalla loro specifica microstruttura e composizione chimica.

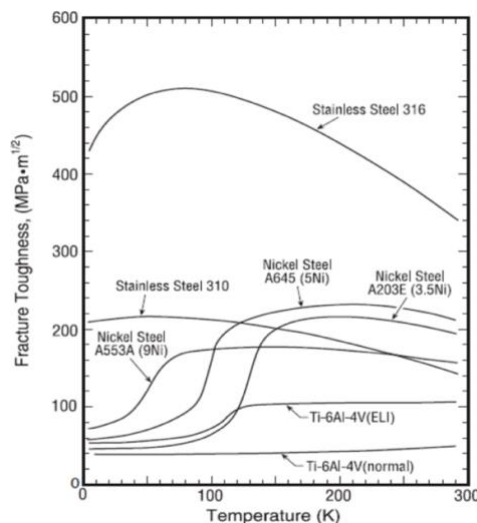


Figura 6 - Tenacità alla frattura di vari metalli a basse temperature. [19]

Se a questo quadro si sovrappone un rilascio criogenico incidentale, il rischio aumenta ulteriormente. Non è infatti solo la temperatura assoluta a determinare la risposta del materiale, ma la velocità con cui essa viene raggiunta e il modo in cui il freddo viene applicato. Risulta particolarmente rilevante comprendere il comportamento di un getto di CO<sub>2</sub> in condizioni di rilascio incidentale: un'eventuale fuoriuscita non si traduce in un semplice efflusso gassoso ma in un getto bifase caratterizzato da espansione rapida, raffreddamento criogenico e formazione di ghiaccio secco. Questo tipo di fenomeno impatta direttamente le strutture circostanti non solo tramite un brusco abbassamento della temperatura, ma anche a causa della velocità e della quantità di moto delle particelle

trasportate dal getto che si traducono in forze dinamiche localizzate che possono esercitare carichi impulsivi significativi sulle superfici investite.

Un getto criogenico ad alta velocità esercita dunque un raffreddamento repentino della superficie colpita, con forti gradienti termici e conseguenti stress di trazione localizzati e un impatto fluidodinamico che amplifica le sollecitazioni meccaniche. Studi sperimentali su getti di azoto liquido mostrano che, in questi scenari, anche acciai che sarebbero tenaci in condizioni statiche a bassa temperatura possono andare incontro a fenomeni di cricche superficiali e a fratture fragili propagate verso l'interno. Il tempo di esposizione, la pressione e la velocità del getto giocano un ruolo cruciale: esposizioni molto brevi ma intense portano a “*thermal shock*”, mentre esposizioni più lunghe stabilizzano le tensioni ma possono comunque infragilire la struttura se la temperatura scende sotto la DBTT del materiale. [30]

In questo contesto, il lavoro sperimentale di *Wu et al. (2023)* [31] fornisce una base empirica solida e rilevante per valutare gli effetti di un rilascio incidentale di CO<sub>2</sub> liquida sulle strutture: è stato costruito un banco sperimentale controllato e sono state misurate la forza d'impatto del getto su una piastra bersaglio, la temperatura superficiale raggiunta e l'influenza di vari parametri operativi (pressione iniziale, diametro del foro, distanza foro-bersaglio e area di impatto) su questi fenomeni. Nelle condizioni testate, come si può vedere in Figura 7 e Figura 8, con pressioni iniziali di 2,3-5 MPa e fori tra 2 e 4,8 mm, a distanze di 0,25-1,5 m, il getto è stato in grado di raffreddare la piastra fino a circa -90°C e di generare forze di impatto misurate fino a circa 44,5 N nelle condizioni più severe del test.

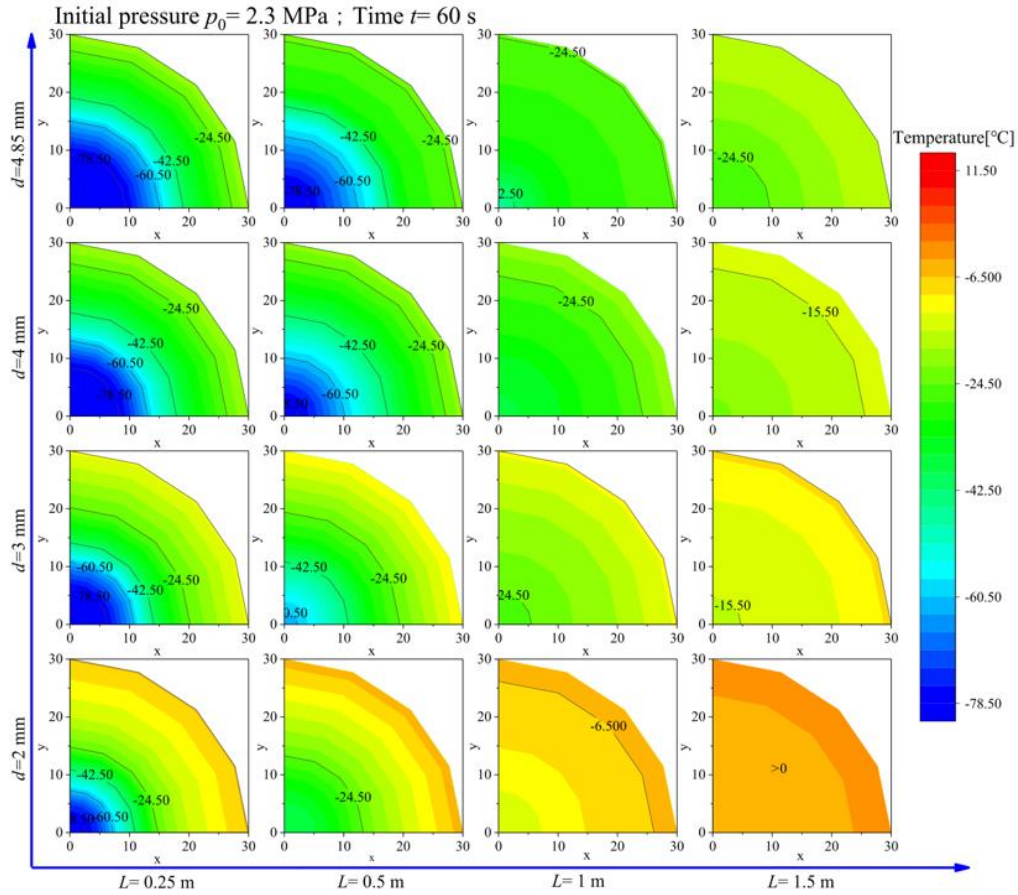


Figura 7 - Distribuzioni della temperatura di impatto dei getti di CO<sub>2</sub> liquida con diverse dimensioni del foro e distanze di impatto. [31]

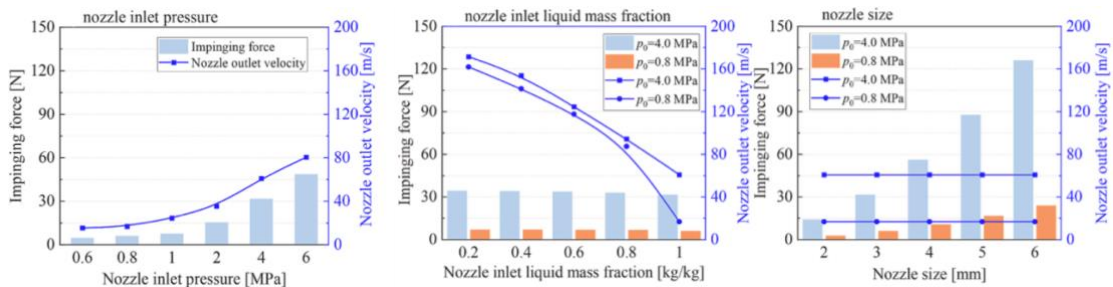


Figura 8 - Risultati calcolati della velocità del getto e della forza d'impatto in diverse condizioni ( $L = 0,25$  m). [31]

Il principale risultato dello studio è l'approccio sperimentale diretto che quantifica effetti concretamente misurabili (forze e temperature) in condizioni riconducibili; tuttavia, presenta dei limiti importanti quando l'obiettivo è stimare l'effetto strutturale complessivo in scenari reali. In particolare, l'assenza di misure dirette di velocità del getto e di frazionamento di fase rende difficile estrapolare i dati a scenari reali. Senza una caratterizzazione della velocità e della densità del getto è difficile passare da forze puntuali misurate a scenari di carico distribuito su componenti complesse.

Questa lacuna può essere in parte colmata dai valori sul *dry-ice blasting*, che mostrano come le particelle solide possano raggiungere velocità elevate e aumentare considerevolmente il trasferimento di quantità di moto [32]. Analogamente, studi numerici su getti abrasivi di CO<sub>2</sub> supercritica confermano che l'efficacia erosiva e l'impulso trasmesso dipendono criticamente da densità, viscosità e presenza di solidi [33]. Un ulteriore quadro è mostrato da *Shang et al.* (2025) [34] che mostra come nei rilasci ad alta pressione, la transizione di fase e gli effetti termodinamici nel campo prossimo determinino la formazione di discontinuità nel getto (dischi di Mach, Figura 9) e di nubi di particelle solide che modificano la densità locale. L'uso della modellizzazione CFD consente di predire non solo la distanza di pericolo per la dispersione gassosa, ma anche i campi di velocità e pressione che determinano l'impatto su superfici vicine.

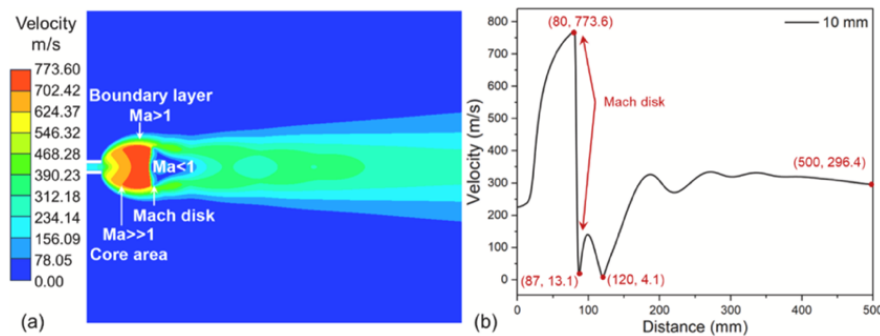


Figura 9 - Distribuzione della velocità all'interno del dominio di perdita a 10 ms: (a) grafico del contorno nel piano XOY e (b) variazione della velocità lungo l'asse del foro di perdita. [34]

Alla luce di queste evidenze, si denota come l'esposizione delle strutture a un rilascio criogenico di CO<sub>2</sub> comporta un rischio combinato di shock termico e carico dinamico. La letteratura mostra che i dati sperimentali disponibili, pur preziosi, non sono ancora sufficienti a fornire un quadro predittivo completo, poiché mancano misure sistematiche sulla velocità delle particelle e sulla distribuzione delle fasi. La modellizzazione avanzata (CFD multifase) è oggi l'unico strumento in grado di colmare tali lacune, ma necessita di validazione sperimentale più ampia. Dal punto di vista tecnologico, la progettazione delle infrastrutture deve prevedere materiali con DBTT molto basse (acciai al nichel, inox austenitici, leghe leggere). La ricerca futura dovrà integrare approcci sperimentali, numerici e materiali per sviluppare criteri di progetto realmente capaci di mitigare il rischio di infragilimento e cedimenti catastrofici in scenari di rilascio incidentale.

### 1.6.3 Sintesi dei meccanismi criogenici e parametri rilevanti

Dall'analisi degli effetti criogenici emerge come il rilascio di CO<sub>2</sub> liquida non generi un unico meccanismo di danno, ma un insieme di fenomeni tra loro interconnessi, legati alla rapida espansione del getto, alle transizioni di fase e alla possibile formazione di ghiaccio secco.

Nella parte finale dello studio, il modello di *Lou et al. (2024)* integra la determinazione delle distanze di danno per i tre meccanismi fondamentali (asfissia, ustioni criogeniche e inalazione di ghiaccio secco) attraverso un approccio di QRA che combina la forza della sorgente, la dose-risposta e le distanze di impatto. Questo approccio consente di superare la semplificazione IOGP, passando da una stima puramente statistica della letalità a una valutazione realistica basata sulle condizioni iniziali del rilascio e sui fenomeni fisici dinamici.

La Tabella 5 mostra le ipotesi adottate per la definizione delle soglie di esposizione, ovvero come i limiti non possano essere considerati valori universali, poiché variano a seconda del soggetto coinvolto (uomo, animale o apparecchiatura) e della combinazione di concentrazione e tempo di esposizione. Proprio su questo punto, lo studio richiama il modello “*toxic load*” elaborato dall'HSE [27], che traduce il rischio di funzione congiunta di dose e durata, distinguendo lo SLOT (*Specified Level of Toxicity*, tipicamente associato a un tasso di mortalità dell'1%) e lo SLOD (*Significant Likelihood of Death*, corrispondente a circa il 50% di mortalità). L'approccio non è dunque statistico ma dinamico: la stessa concentrazione di CO<sub>2</sub> può risultare relativamente tollerabile o altamente pericolosa in funzione del tempo di esposizione.

Tabella 5 - Valori per la valutazione della distanza di pericolo [28]

| Rischi                                                                | Limite di esposizione per l'uomo | Limite di esposizione per gli animali | Limite di esposizione per le apparecchiature               |
|-----------------------------------------------------------------------|----------------------------------|---------------------------------------|------------------------------------------------------------|
| Asfissia                                                              | C <sub>pe</sub> (% v/v)          | C <sub>an</sub> (% v/v)               | /                                                          |
| Guasto del dispositivo basato sulla concentrazione di CO <sub>2</sub> | /                                | /                                     | C <sub>eq</sub> (% v/v; determinata da un'apparecchiatura) |

|                                            |                 |                 |                                            |
|--------------------------------------------|-----------------|-----------------|--------------------------------------------|
| Inalazione di particelle di ghiaccio secco | $G_{pe}$ (kg/s) | $G_{an}$ (kg/s) | /                                          |
| Ustione criogenica                         | $T_{pe}$ (°C)   | $T_{an}$ (°C)   | /                                          |
| Danni da bassa temperatura                 | /               | /               | $T_{eq}$ (°C; determinata dalla struttura) |

Questi risultati mettono in luce la natura eccessivamente riduttiva delle curve impiegate dagli standard IOGP, che si basano su relazioni statistiche semplificate tra temperatura e probabilità di letalità, trascurando la complessità dei fenomeni multifase e gli effetti combinati di temperatura, velocità e sublimazione. Pertanto, questo studio non solo migliora la comprensione teorica dei rilasci di CO<sub>2</sub> criogenica, ma hanno anche un valore pratico concreto: permettono di definire distanze di sicurezza più realistiche, progettare barriere protettive adeguate e ridurre l'incertezza nella gestione dei rischi industriali.

## 1.7 Sintesi critica della fisica dei rilasci e dei criteri di vulnerabilità

L'analisi ha mostrato come l'anidride carbonica, pur essendo una molecola stabile e non infiammabile, presenti un insieme di caratteristiche che la rendono critica dal punto di vista della sicurezza. Non si tratta di un singolo meccanismo, ma di una combinazione di fattori fisici, ambientali e fisiologici che, interagendo tra loro, amplificano gli effetti di un rilascio.

I limiti delle attuali linee guida emergono chiaramente: semplificare la CO<sub>2</sub> a un gas asfissiante o trattarla alla stregua di altri fluidi criogenici significa perdere di vista dinamiche che possono fare la differenza tra scenari gestibili e catastrofici. Le evidenze della letteratura mostrano come le transizioni di fase, la formazione di ghiaccio secco e le interazioni termiche con l'ambiente non siano dettagli marginali, ma elementi centrali per comprendere la reale portata dei rischi. Anche le conseguenze per le persone e le strutture non seguono logiche lineari: piccole variazioni nelle condizioni iniziali possono tradursi in effetti sproporzionati e difficili da prevedere.

Proprio per questo diventa indispensabile spingersi oltre l'approccio descrittivo e adottare strumenti capaci di cogliere la complessità dei fenomeni. La modellizzazione numerica si propone come un passaggio necessario: non solo per quantificare con maggiore precisione distanze di danno e livelli di esposizione, ma anche per costruire scenari più realistici, capaci di riflettere l'interazione tra fisica, tossicologia e ingegneria. Solo tramite la modellizzazione numerica affiancata all'attività sperimentale si può arrivare a definire dei criteri di vulnerabilità universali.

## 2 MODELLAZIONE DEI RILASCI DI CO<sub>2</sub>: STATO DELL'ARTE

Nell'ambito dell'analisi del rischio industriale, la modellazione degli incidenti consente di simulare scenari di rilasci incidentale di sostanze pericolose e di valutarne la dispersione e le conseguenze potenziali sull'ambiente e sulla sicurezza delle persone. In generale, il fenomeno può essere descritto come una sequenza di fasi fisiche: inizialmente avviene il rilascio della sostanza, che può manifestarsi sotto forma di getto o perdita da una sorgente; successivamente si sviluppa la dispersione della nube, influenzata da fattori quali la densità del gas, le condizioni meteorologiche e la presenza di ostacoli e geometrie complesse.

I modelli di dispersione consentono di descrivere quantitativamente l'evoluzione di tali fenomeni, fornendo informazioni sulle concentrazioni di sostanza nello spazio e nel tempo, sulla propagazione della nube e sull'eventuale formazione di zone di accumulo. Attraverso simulazioni numeriche è quindi possibile costruire mappe e sezioni di isoconcentrazione, individuare la distribuzione spaziale delle concentrazioni, valutare la durata dell'esposizione e stimare parametri caratteristici quali il volume della nube o le aree in cui determinate soglie di concentrazione vengono superate.

È importante sottolineare che tali risultati descrivono principalmente le conseguenze fisiche dello scenario incidentale, ovvero l'evoluzione e la distribuzione del fenomeno di dispersione. La valutazione del danno avviene invece in una fase successiva, applicando criteri o modelli di vulnerabilità che mettono in relazione le concentrazioni e i tempi di esposizione con possibili effetti sulla salute o sulla sicurezza. In questo modo, la modellazione consente prima di ricostruire il campo di concentrazione generato dall'incidente e successivamente di verificare se, e in quali condizioni, le soglie associate a effetti dannosi possano essere raggiunte o superate.

La modellazione degli incidenti di rilascio di CO<sub>2</sub>, soprattutto nei casi in cui intervengono transizioni di fase, quali il passaggio di stato liquido-gas, la formazione di ghiaccio secco o le interazioni termiche con l'ambiente, richiede un approccio metodologico rigoroso. Se nel capitolo precedente è emerso come le semplificazioni comuni possano far perdere elementi fondamentali per la valutazione del rischio, ora si rende necessario esplicitare

come queste dinamiche vengano simulate numericamente, con quali strumenti, con quali assunzioni e con quali limiti.

In ambito *process safety*, la modellazione numerica rappresenta infatti un passaggio essenziale per supportare la QRA (*Quantitative Risk Assessment*) e, nel caso di rilasci criogenici, la FECRA (*Fire, Explosion and Cryogenic Risk Assessment*). Tuttavia, la molteplicità degli scenari richiesti dalle analisi di rischio impone un compromesso tra accuratezza fisica e sostenibilità computazionale: per questo, nella pratica industriale coesistono approcci modellistici di complessità molto diversa, che vanno dai modelli integrali e semi-empirici fino ai codici CFD tridimensionali.

Come sottolineato dalla Direttiva *Offshore Safety 2013/30/EU* [35] e dalla Direttiva Seveso (Decreto Legislativo 26 giugno 2015, n. 105) per gli impianti onshore [36], la QRA rappresenta lo strumento metodologico riconosciuto per la dimostrazione di sicurezza dei grandi impianti industriali. La simulazione numerica degli eventi incidentali costituisce una fase essenziale per quantificare le conseguenze e le aree di rischio, ma la molteplicità degli scenari richiede un bilanciamento fra accuratezza e tempo di calcolo.

Alla luce di queste considerazioni, il presente capitolo propone una rassegna critica degli approcci di modellazione oggi disponibili per i rilasci di CO<sub>2</sub>, con particolare attenzione alla assunzioni fisiche, ai campi di applicabilità e ai limiti intrinseci di ciascun metodo. L'analisi è organizzata distinguendo tra modelli analitici e modelli CFD, al fine di chiarire il ruolo che ciascuna famiglia di strumenti può svolgere nell'ambito della sicurezza degli impianti industriali e di motivare le scelte metodologiche adottate nei capitoli successivi.

## 2.1 Approcci alla modellazione dei rilasci di CO<sub>2</sub>

La modellazione dei rilasci incidentali si è sviluppata storicamente seguendo due linee principali. La prima è rappresentata dai modelli analitici e semi-empirici, nati con l'obiettivo di fornire stime rapide e conservative delle conseguenze di un rilascio, e tuttora largamente impiegati nelle QRA. La seconda comprende i modelli basati sulla *Computational Fluid Dynamics* (CFD), che mirano a una descrizione più dettagliata della fisica del fenomeno, a fronte di un maggiore impiego computazionale e di una maggiore complessità nell'impostazione delle simulazioni.

Nei paragrafi seguenti questi approcci vengono analizzati separatamente, mettendo in evidenza i presupposti teorici su cui si basano e le implicazioni che tali presupposti hanno nella simulazione dei rilasci di CO<sub>2</sub>, in particolare in presenza di gas densi, condizioni criogeniche e geometrie industriali complesse.

### 2.1.1 Modelli analitici e semi-empirici per la dispersione di CO<sub>2</sub>

I modelli analitici e semi-empirici rappresentano storicamente il primo approccio sviluppato per la simulazione dei rilasci incidentali di sostanze pericolose in atmosfera. Essi nascono con l'obiettivo di fornire stime rapide delle conseguenze di un incidente, privilegiando la semplicità di applicazione e la robustezza numerica rispetto a una rappresentazione dettagliata dei fenomeni fisici. Per questo motivo, tali modelli costituiscono ancora oggi la base operativa della maggior parte delle QRA condotte in ambito industriale.

Dal punto di vista concettuale, questi approcci descrivono il rilascio e la dispersione attraverso relazioni chiuse che derivano da soluzioni semplificate delle equazioni di conservazione, integrate con correlazioni empiriche ottenute da campagne sperimentali o da incidenti reali. La nube viene trattata come un'entità globalmente omogenea, caratterizzata da grandezze medie (concentrazione, densità, velocità di avanzamento), e la sua evoluzione viene descritta lungo una o più dimensioni spaziali, generalmente assumendo condizioni di campo aperto, terreno piano e assenza di ostacoli.

Tra gli strumenti più diffusi in ambito industriale rientra il software PHAST, sviluppato da DNV, che implementa una catena di modelli per la descrizione del rilascio, dell'eventuale flashing, della dispersione atmosferica e della valutazione degli effetti. PHAST si basa in larga misura sul *Unified Dispersion Model* (UDM), sviluppato da Britter e McQuaid (1988) [37], che fornisce una descrizione semplificata del rilascio e della dispersione in atmosfera. L'approccio di PHAST consente tempi di calcolo molto rapidi e una facile applicazione ma assume condizioni di dominio semplificate (spazio aperto, assenza di ostacoli, geometrie ideali). Studi comparativi [38] hanno mostrato come PHAST possa talvolta sovrastimare le aree di danno in ambienti complessi, proprio a causa dell'impossibilità di modellare l'interazione tra il getto e gli ostacoli o le strutture. Tuttavia, l'influenza degli ostacoli sulla dispersione non è sempre conservativa: in alcune

configurazioni, le strutture possono canalizzare la nube favorendone la propagazione su distanze maggiori rispetto a quelle osservabili in campo aperto.

Accanto a PHAST, la letteratura e la pratica regolatoria riportano numerosi altri modelli ampiamente utilizzati. Tra questi, il modello SLAB [39], sviluppato nell'ambito dei *Lawrence Livermore National Laboratory*, è stato per lungo tempo uno strumento di riferimento per la dispersione dei gas densi, ed è ancora oggi impiegato in contesti di ricerca e validazione. Analogamente, i modelli DEGADIS [40], HEGADIS [41] sono stati sviluppati specificatamente per la simulazione dei rilasci di gas pesanti, con particolare attenzione alla fase di abbassamento gravitazionale della nube e alla propagazione lungo il suolo. In ambito applicativo, strumenti come ALOHA [42] e EFFECTS (Gexcon) [43] sono largamente utilizzati per valutazioni rapide, grazie alla loro estrema semplicità e alla ridotta richiesta di dati in ingresso.

Il principale punto di forza dei modelli analitici e semi-empirici risiede nell'elevata efficienza computazione e nella facilità di integrazione all'interno di studi di rischio su larga scala, per i quali è necessario modellare innumerevoli scenari incidentali. Essi consentono di analizzare rapidamente un elevato numero di scenari, variando condizioni meteorologiche, dimensioni del rilascio e durata dell'evento, risultando particolarmente adatti alle fasi preliminari di progettazione e alle QRA richieste dalla normativa. La struttura relativamente semplice di tali modelli favorisce inoltre una maggiore trasparenza delle assunzioni adottate e una più immediata interpretazione dei risultati.

Tali vantaggi sono tuttavia ottenuti a fronte di ipotesi fortemente semplificative che ne limitano l'applicabilità in contesti industriali complessi. La maggior parte di questi modelli assume infatti domini aperti e privi di ostacoli, trascurando l'interazione tra la nube e le strutture reali. Nel caso della CO<sub>2</sub>, caratterizzata da elevata densità, ciò impedisce di rappresentare adeguatamente fenomeni di accumulo in zone basse o parzialmente confinate e la formazione di concentrazioni localmente elevate.

Ulteriori limiti riguardano la descrizione della fase di rilascio, spesso basata su correlazioni semplificate che non colgono la struttura del getto, i rilasci sotto-espansi e l'interazione con ostacoli prossimi alla sorgente. Infine, l'approccio generalmente conservativo adottato da questi modelli può condurre a una sovrastima sistematica delle distanze di danno in ambienti complessi, con il rischio di un sovradimensionamento delle

misure di mitigazione e di una scarsa discriminazione tra scenari realmente critici e scenari meno rilevanti, soprattutto in impianti offshore o comunque fortemente congestionati.

Alla luce di tali limiti, pur riconoscendo il ruolo centrale dei modelli analitici nella pratica della valutazione del rischio, emerge la necessità di affiancarli a strumenti in grado di rappresentare con maggiore fedeltà la fisica del rilascio e della dispersione, in particolare per scenari caratterizzati da gas densi, condizioni criogeniche e geometrie complesse. Tale esigenza costituisce la base per l'impiego dei modelli CFD, discussi nel paragrafo seguente.

### 2.1.2 Modelli CFD per la dispersione di CO<sub>2</sub>

I modelli basati sulla CFD rappresentano l'approccio più avanzato per la simulazione dei rilasci incidentali di sostanze pericolose, in quanto consentono di risolvere in forma esplicita le equazioni di conservazione di massa, quantità di moto ed energia su un dominio tridimensionale discretizzato. A differenza dei modelli analitici e semi-empirici, la CFD non si fonda su una descrizione globale della nube, ma permette di ricostruire l'evoluzione spazio-temporale del campo di moto, della concentrazione e delle grandezze termodinamiche, rendendo possibile una rappresentazione più fedele dei fenomeni fisici coinvolti.

La *Computational Fluid Dynamics* (CFD) nasce come disciplina di frontiera negli anni Sessanta e Settanta, inizialmente applicata ai campi dell'aeronautica e dell'ingegneria aerospaziale, quando la crescente potenza di calcolo rese possibile risolvere numericamente le equazioni di Navier-Stokes. I primi codici *general-purpose* introdussero il concetto di dominio discreto e di mesh come base per la simulazione numerica dei flussi. Con il tempo, la CFD si è evoluta in una disciplina trasversale, oggi utilizzata in campi che spaziano dalla biomedica, fino alla sicurezza dei processi industriali e alla prevenzione di grandi incidenti tecnologici. [44]

Nel contesto della *process safety*, la CFD si propone come strumento per superare i limiti dei modelli empirici e semi-empirici, permettendo una descrizione tridimensionale e

dinamica dei fenomeni complessi, come le dispersioni di gas tossici o infiammabili e le interazioni fluidodinamiche con ostacoli o superfici complesse. [45]

Uno dei principali punti di forza dell'approccio CFD risiede nella capacità di rappresentare in modo esplicito l'interazione tra nube e l'ambiente circostante. La presenza di edifici, apparecchiature, deck offshore e barriere può essere inclusa direttamente nel dominio di calcolo, consentendo di simulare fenomeni quali ricircoli, canalizzazioni del flusso, accumuli locali e effetti di schermatura. Dal punto di vista fisico, la CFD permette inoltre di descrivere in modo più dettagliato la fase di rilascio, superando le schematizzazioni tipiche dei modelli semi-empirici. Il getto iniziale può essere modellato considerando la struttura del flusso, l'espansione sotto-espansa, l'interazione con ostacoli prossimi alla sorgente e, nei casi più avanzati, anche le transizioni di fase e la termodinamica reale del fluido.

Nonostante tali vantaggi, l'impiego della CFD nella valutazione del rischio presenta anche limiti e criticità che ne spiegano la diffusione ancora relativamente limitata nelle QRA di routine. L'elevato onere computazionale delle simulazioni tridimensionali e transitorie rende infatti poco sostenibile l'analisi sistematica di un grande numero di scenari, soprattutto in presenza di domini estesi o di tempi di simulazione significativi. A ciò si affianca la necessità di una calibrazione accurata dei modelli numerici, in particolare per quanto riguarda la turbolenza, le condizioni al contorno e la discretizzazione spaziale, fattori che possono influenzare in modo sensibile i risultati.

Un ulteriore elemento critico è rappresentato dall'introduzione di nuove fonti di incertezza. Se da un lato la CFD riduce le semplificazioni concettuali tipiche dei modelli integrali, dall'altro richiede numerose scelte modellistiche, quali la selezione del modello di turbolenza, il livello di risoluzione della mesh e il trattamento delle proprietà termodinamiche del fluido. In assenza di procedure di validazione consolidate o di linee guida consolidate, tali scelte possono rendere meno immediata l'interpretazione dei risultati e più complesso il loro utilizzo in ambito regolatorio.

Per questi motivi, nella pratica industriale la CFD è generalmente impiegata come strumento di analisi dettagliato, complementare ai modelli analitici e semi-empirici, e applicata a un numero limitato di scenari selezionati caratterizzati da elevata complessità

geometrica, condizioni di rilascio particolarmente gravose o dalla necessità di una valutazione più raffinata delle conseguenze ad esempio per analisi post-incidentali.

Nell'ambito della modellazione della dispersione atmosferica è possibile distinguere due principali approcci: Euleriano e Lagrangiano. Nei modelli Euleriani il dominio di calcolo viene discretizzato in una griglia di celle all'interno della quale vengono risolte le equazioni di conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. Questo approccio consente di rappresentare esplicitamente la geometria del sito e l'interazione tra il flusso e gli ostacoli presenti.

Nei modelli Lagrangiani, invece, il rilascio viene rappresentato mediante un elevato numero di particelle virtuali emesse dalla sorgente e seguite nel loro movimento nello spazio e nel tempo. Analizzando statisticamente il comportamento di un grande numero di particelle è possibile ricostruire la distribuzione delle concentrazioni nello spazio e nel tempo.

Nell'ambito dei modelli Euleriani, lo stato dell'arte distingue inoltre tra codici specialistici, sviluppati specificamente per l'analisi di dispersioni ed eventi incidentali, e codici CFD *general-purpose*, concepiti per applicazioni più generali ma progressivamente estesi allo studio dei rilasci incidentali. Questa distinzione riflette approcci modellistici differenti, caratterizzati da compromessi diversi tra accuratezza fisica, costo computazionale e facilità di impiego.

#### Codici CFD specialistici Euleriani

I codici CFD specialistici Euleriani, quali FLACS sviluppato da Gexcon e KFC, sono stati progettati per la simulazione di dispersioni di gas, esplosioni e fenomeni associati in ambienti industriali complessi. Essi adottano tipicamente formulazioni RANS e includono modelli dedicati per gas densi, ventilazione, confinamento e interazione con ostacoli. Il loro principale punto di forza risiede nella capacità di rappresentare in modo efficace la geometria reale degli impianti mantenendo un equilibrio favorevole tra dettaglio fisico e costo computazionale. [46] [47]

Tuttavia, tali codici si basano spesso su una descrizione semplificata della fase di rilascio, affidata a modelli semi-empirici o a formulazioni porose (come l'approccio DPR<sup>2</sup>), che possono introdurre approssimazioni significative nelle immediate vicinanze della sorgente, soprattutto in presenza di rilasci sottoespansi o di ostacoli prossimi al punto di emissione. Inoltre, i tempi di calcolo richiesti per domini estesi e la necessità di una discretizzazione coerente con le assunzioni del modello ne limitano l'impiego a un numero selezionati di scenari rappresentativi.

#### Codici CFD Euleriani *general-purpose*

I codici CFD *general-purpose*, tra cui Ansys Fluent, STAR-CCM+ e OpenFOAM, offrono invece un livello di generalità e flessibilità significativamente maggiore. Basati sulla soluzione numerica completa delle equazioni di Navier-Stokes, essi consentono di modellare fenomeni multifase, transizioni di fase e termodinamica reale, definendo in modo preciso, mediante CAD 3D la geometria del contesto. La possibilità di implementare modelli personalizzati e funzioni utente amplia ulteriormente il campo di applicazione di questi strumenti, rendendoli adatti a studi di ricerca avanzata e analisi di dettaglio ad alta fedeltà.

A fronte di questi vantaggi, i codici *general-purpose* comportano un onere computazionale elevato e richiedono una calibrazione accurata dei modelli numerici, in particolare per quanto riguarda la turbolenza, la discretizzazione spaziale e il trattamento delle proprietà termodinamiche. Questi aspetti ne rendono complesso l'impiego nelle QRA standardizzate e ne confinano l'uso a studi mirati su scenari selezionati. [48]

Nel complesso, il confronto tra codici CFD specialistici e *general-purpose* evidenzia come non esista un approccio universalmente ottimale per la modellazione dei rilasci di CO<sub>2</sub>. I primi offrono strumenti consolidati e compatibili con il contesto normativo, mentre i secondi garantiscono una maggiore fedeltà fisica e flessibilità. La scelta dipende quindi

---

<sup>2</sup> In questo metodo il rilascio non viene modellato esplicitamente come un getto ad alta velocità, ma rappresentato come un'emissione distribuita attraverso una superficie o un volume equivalente, che consente di imporre direttamente portata e proprietà del fluido senza risolvere nel dettaglio la dinamica del getto.

dagli obiettivi dell'analisi, dal livello di dettaglio richiesto e dal ruolo che la simulazione numerica è chiamata a svolgere all'interno del processo di valutazione del rischio.

In sintesi, lo stato dell'arte mostra come la modellazione dei rilasci di CO<sub>2</sub> richieda un approccio gerarchico, in cui strumenti di diversa complessità vengono impiegati in funzione degli obiettivi dell'analisi. In questo quadro, la CFD non si pone come alternativa ai modelli tradizionali di QRA, ma come strumento complementare per l'analisi di scenari selezionati, nei quali la fedeltà fisica e la rappresentazione della geometria reale risultano determinanti. Su queste basi si innesta il capitolo successivo, dedicato alla metodologia di simulazione adottata nel presente lavoro.



### 3 METODOLOGIA

Alla luce dello stato dell'arte discusso nel capitolo precedente, emerge come la modellazione dei rilasci di CO<sub>2</sub> in contesti industriali complessi richieda l'impiego di strumenti in grado di rappresentare in modo esplicito la geometria reale dell'impianto, le condizioni di rilascio e i fenomeni termo-fluidodinamici associati. In particolare, per scenari caratterizzati da gas densi, condizioni criogeniche e forte congestione strutturale, l'utilizzo della CFD consente di superare molte delle semplificazioni intrinseche dei modelli analitici e semi-empirici, offrendo una descrizione più realistica dell'evoluzione del rilascio e della dispersione.

Il presente capitolo descrive la metodologia di simulazione adottata in questo lavoro per l'analisi dei rilasci incidentali di CO<sub>2</sub>. Tale metodologia si basa su un impianto concettuale e numerico in parte già consolidato e discusso nella letteratura tecnica, che viene qui riorganizzato e adattato agli obiettivi specifici della tesi. In particolare, alcune scelte modellistiche e operative sono già state introdotte in fase preliminare nella stesura iniziale del lavoro.

#### 3.1 Descrizione dell'approccio di modellazione

L'approccio metodologico è stato concepito con l'obiettivo di indagare criticamente il potenziale e i limiti della modellazione tramite modelli integrali e modelli CFD nella valutazione del rischio industriale, con particolare riferimento ai rilasci in fase gassosa e liquida e alla loro rappresentazione all'interno di un contesto geometrico realistico come una piattaforma offshore. L'idea metodologica di fondo è quella di un percorso progressivo e comparativo, in cui modelli di diversa complessità vengono utilizzati in modo complementare, come strumenti che, opportunamente confrontati, consentono di costruire una comprensione più profonda e fisicamente coerente del fenomeno di rilascio. In questo senso, la metodologia non è finalizzata a individuare un "modello migliore" in senso assoluto, ma a chiarire in quali condizioni un determinato livello di complessità risulti necessario o sufficiente.

Il processo inizia con la definizione delle condizioni di rilascio e degli scenari di riferimento, che rappresentano situazioni realistiche di perdita di CO<sub>2</sub> da condotte o serbatoi pressurizzati. Tali condizioni sono state scelte per garantire un equilibrio tra rappresentatività fisica e controllabilità numerica, includendo geometrie e condizioni ambientali coerenti con le applicazioni industriali di cattura, trasporto e stoccaggio della CO<sub>2</sub>. A partire da questa impostazione, la modellazione viene condotta in parallelo su tre diversi codici, un modello integrale (DNV PHAST) e due modelli CFD (FLACS e Ansys Fluent). Questa pluralità di approcci consente di esplorare la stessa realtà da prospettive differenti, confrontando la rapidità e la semplicità dei modelli integrali con la fedeltà fisica dei codici CFD tridimensionali, considerando sia scenari di rilascio di CO<sub>2</sub> in fase gassosa sia in fase liquida, al fine di coglierne le differenti dinamiche di espansione e dispersione.

### 3.1.1 Confronto tra i modelli

La strategia di confronto tra i modelli si fonda su un approccio critico, volto a valutare non solo le differenze numeriche, ma soprattutto la coerenza concettuale e la capacità descrittiva dei diversi strumenti. Il confronto avviene lungo tre assi principali: (i) la rappresentazione fisica e geometrica del fenomeno, che distingue la natura semplificata dei modelli integrali dalla risoluzione spaziale e temporale garantita dei codici CFD; (ii) la scalabilità numerica e i tempi di calcolo, che definiscono il compromesso tra dettaglio fisico e sostenibilità computazionale; (iii) la flessibilità e trasparenza dei modelli fisici implementati, cioè la possibilità di adattare le formulazioni di turbolenza, termofluidodinamica e scambio di calore alle specificità del rilascio di CO<sub>2</sub>.

L'obiettivo del confronto è quindi quello di individuare il livello minimo di complessità modellistica necessario per garantire risultati fisicamente attendibili ai fini della sicurezza industriale e comprendere i limiti di ciascun approccio, chiarendo in quali condizioni i modelli integrali possano fornire stime sufficientemente conservative e quando invece sia indispensabile ricorrere alla CFD.

### 3.1.2 Criteri di vulnerabilità e confronto con la normativa

Un aspetto metodologico di particolare rilievo riguarda la connessione tra i risultati della modellazione degli scenari incidentali e i criteri di vulnerabilità, che permettono la stima del danno finale, comunemente impiegati nelle analisi di rischio. La normativa internazionale definisce una serie di soglie di esposizione che consentono di valutare gli effetti potenzialmente nocivi della CO<sub>2</sub> sull'uomo.

Accanto ai rischi per la salute umana, è necessario considerare anche gli effetti fisici del rilascio di CO<sub>2</sub> liquida o supercritica sulle strutture, che rientrano nell'ambito della FECRA (*Fire, Explosion, Cryogenic Risk Assessment*). Il rilascio di CO<sub>2</sub> a basse temperature può generare fenomeni criogenici significativi, con potenziali impatti su materiali metallici, guarnizioni, componenti in gomma o plastica, e sulle strutture di contenimento. Le simulazioni CFD, in questo caso, permettono di stimare i campi di temperatura, la distribuzione della frazione liquida e l'estensione delle aree soggette a raffreddamento intenso, elementi fondamentali per valutare la vulnerabilità strutturale in condizioni transitorie.

### 3.1.3 Processo iterativo

Dal punto di vista operativo, le simulazioni vengono condotte in sequenza logica: si parte da un modello integrale (PHAST), che fornisce un inquadramento macroscopico del fenomeno e consente una prima stima delle distanze di danno; si passa poi a un modello CFD specialistico (FLACS), capace di descrivere la dispersione in un ambiente realistico, includendo la presenza di ostacoli e condizioni di ventilazione; infine, si approfondiscono gli aspetti più complessi attraverso simulazioni ad alta risoluzione con un codice *general-purpose* (Ansys Fluent), in grado di risolvere le equazioni di stato reali e di rappresentare il comportamento bifase del fluido. Ogni livello di modellazione costituisce un tassello complementare del processo: i risultati vengono confrontati, validati e utilizzati per calibrare progressivamente la rappresentazione fisica del modello.

L'analisi dei risultati è condotta secondo una chiave di lettura critica e comparativa. Le principali grandezze di interesse (concentrazione, temperatura e velocità) vengono monitorate nel tempo e nello spazio, al fine di valutare le capacità dei modelli di

riprodurre la dinamica della nube e l'estensione delle aree di danno. Particolare attenzione è rivolta al confronto tra le distanze di danno ottenute con i diversi software, poiché queste distanze rappresentano indicatori della severità del rilascio e della coerenza delle ipotesi conservative adottate in sede di QRA. In parallelo, i risultati vengono impiegati per verificare la coerenza e la sensibilità dei criteri adottati, sia in termini di effetti sull'uomo sia in relazione agli effetti criogenici sulle strutture. Tale confronto consente di affinare non solo la rappresentazione fisica del fenomeno, ma anche la definizione stessa delle soglie di danno.

Laddove le simulazioni CFD evidenziano scostamenti significativi rispetto alle stime derivanti da modelli integrali, si analizzano criticamente le cause di tale divergenza.

## 4 CASI STUDIO E IMPOSTAZIONE DEI MODELLI

I casi studio sviluppati in questo lavoro rappresentano la fase applicativa dell'approccio metodologico descritto in precedenza. Essi sono stati definiti per analizzare, in condizioni controllate ma realistiche, il comportamento dei rilasci di CO<sub>2</sub> ipotizzando un ambiente offshore, distinguendo tra fase gassosa e fase liquida.

L'obiettivo è valutare come la diversa natura termodinamica del fluido e le condizioni di ventilazione influenzino la dispersione e la formazione delle aree di danno, nonché verificare la capacità dei modelli numerici di riprodurre fedelmente tali fenomeni. Tutti gli scenari condividono la stessa geometria di riferimento, in modo da consentire un confronto diretto tra le simulazioni e un'analisi coerente dei risultati ottenuti con i diversi software di modellazione.

### 4.1 Inquadramento generale dei casi studio

La fase iniziale del lavoro ha riguardato la definizione degli scenari di rilascio. Il dominio geometrico adottato per la simulazione riproduce le caratteristiche essenziali della piattaforma offshore, includendo strutture, ostacoli e superfici che possono influenzare la dispersione del gas. In questo modo è stato possibile valutare l'interazione tra la dinamica del rilascio e complessità geometrica dell'ambiente circostante.

Il dominio geometrico utilizzato per le simulazioni è ispirato alla configurazione tipica delle piattaforme offshore dedicate all'estrazione di gas naturale nell'Adriatico. Sebbene tali installazioni comprendano naturalmente ponti di lavoro su più livelli, in questo studio è stato considerato esclusivamente il ponte di produzione, poiché i piani metallici che separano i diversi deck agiscono come barriere fisiche tali da confinare la dispersione all'interno del livello in cui avviene il rilascio. Questa scelta consente di ridurre la complessità geometrica senza compromettere la rappresentatività fisica del problema, mantenendo la possibilità di analizzare fenomeni di accumulo rilevanti ai fini della sicurezza.

#### 4.1.1 Riferimento sperimentale: galleria del vento SEASTAR WT

La definizione dei casi studio e l'impostazione dei modelli CFD adottati nel presente lavoro sono strettamente connesse alla disponibilità di un riferimento sperimentale consolidato, rappresentato dalla galleria del vento SEASTAR WT (*Wind Tunnel*), sviluppata per lo studio della dispersione di gas in presenza di vento e geometrie complesse.

Il laboratorio SEASTAR WT, nato da una collaborazione tra il Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica (MASE), il Politecnico di Torino e l'Istituto Italiano di Tecnologia (IIT) presso l'Environment Park di Torino, è una struttura sperimentale progettata per consentire l'esecuzione di rilasci controllati di gas (in modo specifico gas naturale, idrogeno e anidride carbonica) in condizioni di sicurezza, riproducendo in scala ridotta scenari incidentali realistici.

All'interno della camera di test, come si vede in Figura 10, è installato un *mock-up* di piattaforma offshore in scala 1:10, ispirato a una tipica installazione per l'estrazione di gas naturale situata nel mare Adriatico. La piattaforma reale presenta dimensioni planimetriche dell'ordine di 30x20 m; di conseguenza, il modello in scala ha dimensioni pari a 3x2 m, con una distanza interpiano di 0,5 m. il *mock-up* riproduce tre livelli del deck, con particolare attenzione al ponte di produzione, ritenuto il livello più critico per la possibile occorrenza di rilasci incidentali.



Figura 10 - Mock-up del modello 1:10 in galleria del vento

La piattaforma in scala è dotata di una rete di sensori di concentrazione (Figura 11), installati sugli ostacoli e in posizioni strategiche del dominio, in modo da non alterare la geometria esterna e il comportamento fluidodinamico del flusso. Le misure sperimentali raccolte durante le campagne in galleria del vento costituiscono una base dati di riferimento per la validazione dei modelli numerici.



*Figura 11 - Sensoristica presente sul mock-up*

#### 4.1.2 Definizione del dominio geometrico

Nel presente lavoro si è scelto di adottare questa specifica geometria come dominio di riferimento per tutte le simulazioni numeriche, al fine di garantire coerenza metodologica e comparabilità dei risultati. L'utilizzo di una piattaforma offshore caratterizzata da elevata congestione strutturale consente infatti di analizzare la dispersione della CO<sub>2</sub> in un contesto realistico e particolarmente sfidante dal punto di vista fluidodinamico, in cui gli effetti di ostacoli, confinamento parziale e ventilazione giocano un ruolo determinante.

L'adozione di questa specifica geometria nasce da una duplice esigenza:

- Riferimento sperimentale validato: la piattaforma scelta è stata oggetto di un ampio programma sperimentale condotto nella galleria del vento SEASTAR, realizzata per lo studio dei rilasci di gas ad alta pressione in ambiente controllato. In tale campagna sono state effettuate prove di rilascio in scala 1:10, con misurazioni sperimentali delle concentrazioni e della velocità del flusso mediante sensori distribuiti su una riproduzione fisica della piattaforma [49]. L'esistenza di

una base di dati sperimentali validata costituisce un elemento fondamentale per l'attività di modellazione CFD, consentendo di verificare la coerenza fisica delle simulazioni numeriche e di quantificare il margine di deviazione tra modello e realtà. L'utilizzo della stessa geometria assicura quindi una compatibilità diretta tra i risultati ottenuti nei software di simulazione e i dati sperimentali raccolti.

- Rappresentatività fisica e realismo operativo: la piattaforma offshore rappresenta un contesto geometrico di particolare interesse per le analisi di dispersione, poiché combina elevata congestione strutturale e spazi aperti. Tali caratteristiche influenzano in modo sostanziale la dinamica del flusso: gli ostacoli generano separazioni e ricircolazioni, la morfologia aperta favorisce lo sviluppo del vento e la miscelazione, e la disposizione dei piani metallici può fungere da barriera o da catalizzatore di turbolenza.

La geometria CAD della piattaforma, come si vede in Figura 12, comprende un ponte di coperta rettangolare di dimensioni pari a circa 30 m x 20 m e un'altezza strutturale di circa 8 m, al cui interno sono disposti apparati tipici di un modello di processo offshore.

Il punto di rilascio considerato in questa analisi è localizzato su una linea di processo laterale di coordinate -12,23x7 ad una quota di circa 1,5 m sopra il piano del ponte e orientato orizzontalmente (indicato dal cubo nero e la freccia rossa).

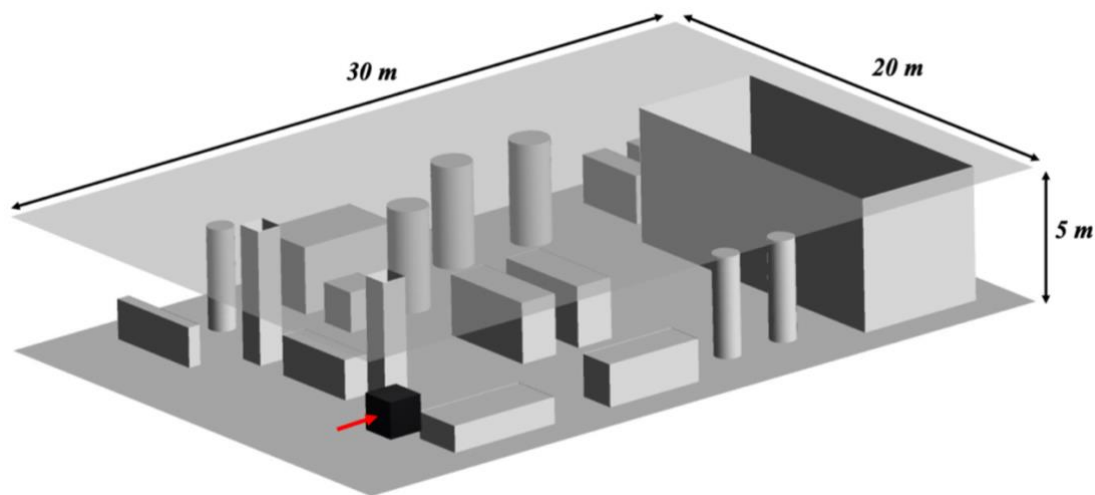


*Figura 12 - Geometria CAD del ponte della piattaforma offshore con le sue dimensioni. [49]*

L'impiego di una geometria già caratterizzata in letteratura permette di ridurre le incertezze del modello e di confrontare direttamente i risultati con dati già validati.

#### 4.1.3 Definizione degli scenari di rilascio

Come si vede in Figura 13, le simulazioni sono state condotte in condizioni atmosferiche standard, assumendo la deviazione del vento coerente con i dati meteo-ambientali tipici dei siti costieri. Il vento, considerato costante a 6 m/s, è stato modellato considerando tre configurazioni principali: una allineata all'asse del rilascio ( $0^\circ$ ), una inclinata di  $45^\circ$  rispetto ad esso e una ortogonale all'asse del rilascio ( $90^\circ$ ). Questa scelta consente di analizzare l'influenza della direzione del vento sul comportamento della nube di  $\text{CO}_2$ , valutando sia una condizione di dispersione prevalentemente longitudinale, sia una situazione in cui l'interazione tra getto e vento introduce componenti trasversali di trasporto e miscelamento. I parametri di turbolenza sono stati impostati in accordo con i modelli di riferimento per la turbolenza atmosferica, garantendo una rappresentazione realistica del campo di vento.

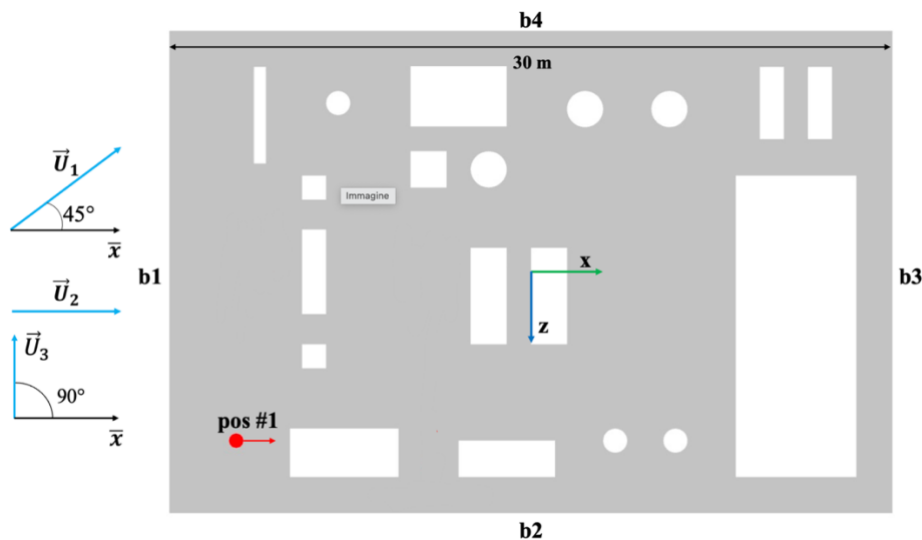


Figura 13 - Vista dall'alto della geometria CAD del ponte con una rappresentazione schematica delle posizioni e delle direzioni delle perdite (puntini/frecce rossi) e delle direzioni del vento (frecce ciano).

Sono stati analizzati due gruppi principali di scenari, distinti in base alla fase del fluido al punto di rilascio:

- Rilasci in fase gassosa, rappresentativi di condizioni di esercizio a pressione moderata;
- Rilasci in fase liquida, caratterizzati da temperature inferiori al punto critico e soggetti a fenomeni di espansione e raffreddamento criogenico.

La combinazione tra le due fasi e le tre configurazioni di vento consente di esplorare una gamma completa di condizioni fisiche, mettendo in evidenza le diverse modalità di dispersione e le possibili configurazioni critiche dal punto di vista della sicurezza.

Le condizioni di rilascio vengono riassunte in Tabella 6.

*Tabella 6 - Condizioni di rilascio per i diversi casi studio*

| Scenario  | Fase    | Pressione di rilascio [bar] | Temperatura [K] | Direzione del vento |
|-----------|---------|-----------------------------|-----------------|---------------------|
| CS#1 (G1) | Gassosa | 50                          | 300             | 0°                  |
| CS#2 (G2) | Gassosa | 50                          | 300             | 45°                 |
| CS#3 (G3) | Gassosa | 50                          | 300             | 90°                 |
| CS#4 (L1) | Liquida | 18,5                        | 244,15          | 0°                  |
| CS#5 (L2) | Liquida | 18,5                        | 244,15          | 45°                 |
| CS#6 (L3) | Liquida | 18,5                        | 244,15          | 90°                 |

Tutti gli scenari si riferiscono alla stessa piattaforma offshore, descritta nella sezione successiva e che costituisce un principio di coerenza comparativa legata a condizioni al contorno e geometria e scala di dominio.

#### Tipologia e durata del rilascio

In tutti i casi analizzati, il rilascio è stato modellato come continuo, in modo da rappresentare una perdita sostenuta nel tempo da una linea di processo, piuttosto che un evento istantaneo o impulsivo. Tale ipotesi è coerente con scenari incidentali realistici associati a danneggiamenti meccanici, corrosione o guasti su condotte di media dimensione, per il quali il rilascio può protrarsi per tempi dell'ordine di diversi minuti prima dell'intervento dei sistemi di isolamento o depressurizzazione.

Nei software PHAST e FLACS il rilascio è stato simulato come transitorio, con una durata complessiva pari a 600 s. questo intervallo temporale è stato scelto in quanto sufficiente a consentire lo sviluppo completo della nube di gas e il raggiungimento di una configurazione di dispersione prossima a una condizione quasi stazionaria, che risulta di

maggior interesse ai fini della valutazione delle conseguenze e dell'estensione delle aree potenzialmente pericolose.

Nel caso delle simulazioni effettuate con ANSYS Fluent, il rilascio è stato invece modellato come stazionario, assumendo che il campo di moto e di concentrazione raggiunga un regime rappresentativo della fase finale del rilascio continuo. Tale scelta è giustificata dal fatto che l'obiettivo principale dell'analisi CFD è la caratterizzazione dettagliata della dispersione a regime e delle interazioni tra il getto e la geometria complessa della piattaforma. In questo senso, l'approccio stazionario adottato in Fluent rappresenta un'idealizzazione coerente della fase finale del rilascio transitorio simulato con gli altri codici, permettendo un confronto consistente tra i diversi strumenti di calcolo.

#### Inquadramento termodinamico delle condizioni di rilascio

Le condizioni di pressione e temperatura selezionate per gli scenari di rilascio sono state analizzate anche dal punto di vista termodinamico, facendo riferimento al diagramma di stato della CO<sub>2</sub>. In particolare, i punti corrispondenti ai rilasci in fase gassosa (50 bar, 300 K) e in fase liquida (18,5 bar, 244,15 K) risultano collocati in regioni ben definite del diagramma, lontane dalle curve di equilibrio di fase e dal punto critico.

Questo aspetto è rilevante in quanto consente di evitare condizioni prossime a transizioni di fase, che introdurrebbero ulteriori complessità fisiche e incertezze modellistiche, quali fenomeni di flashing bifase difficilmente rappresentabili in modo robusto all'interno dei codici di calcolo utilizzati. La collocazione dei punti di rilascio in regioni termodinamicamente stabili garantisce quindi che la fase iniziale del fluido sia chiaramente definita e che i modelli di rilascio e dispersione adottati rimangano validi per tutta la durata dell'evento simulato.

A supporto di questa analisi è stato riportato il diagramma di stato della CO<sub>2</sub> con l'indicazione dei punti di rilascio considerati (Figura 14), al fine di fornire un immediato riscontro grafico della coerenza termodinamica delle condizioni selezionate.

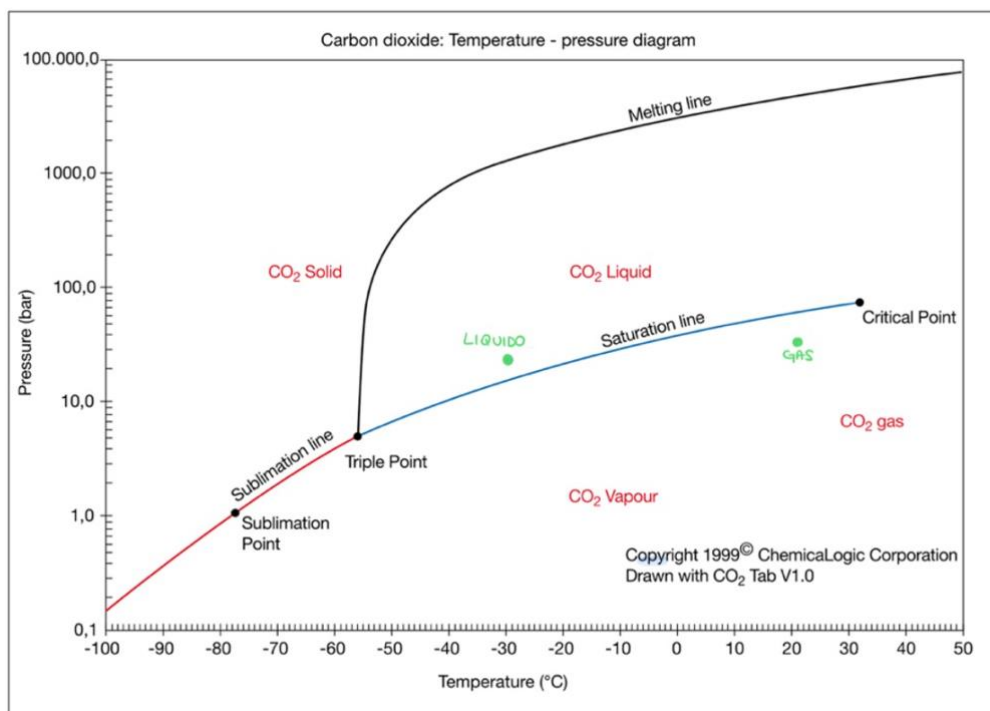


Figura 14 - Diagramma di stato della CO<sub>2</sub> con indicazione dei punti di rilascio considerati

### Motivazione delle scelte di pressione, temperatura e geometria del rilascio

I valori di pressione e temperatura adottati per i rilasci in fase gassosa e liquida sono stati selezionati in quanto rappresentativi di condizioni tipiche di stoccaggio e trasporto della CO<sub>2</sub> in applicazioni industriali e offshore. Tali condizioni risultano realistiche per linee di processo e sistemi di gestione della CO<sub>2</sub>, sia in fase gassoso sia in fase liquida, e consentono di analizzare scenari rilevanti dal punto di vista della sicurezza.

Negli scenari è stato considerato un foro di rilascio circolare di diametro pari a 30 mm, rappresentativo di una perdita significativa su una linea di processo di media dimensione. Questa scelta consente di ottenere un rilascio con una portata sufficientemente elevata da generare un getto sviluppato e stabile, permettendo di analizzare in modo significativo i fenomeni di dispersione e l'interazione del flusso con la geometria della piattaforma.

L'adozione delle stesse condizioni di pressione, temperatura, diametro del foro e geometria del dominio per tutti gli scenari garantisce inoltre la coerenza comparativa dell'analisi: le differenze osservate nei risultati possono essere attribuite in modo diretto alla fase del fluido e alla configurazione del vento, evitando l'introduzione di variabili

aggiuntive che renderebbero meno chiara l'interpretazione degli effetti fisici predominanti.

#### 4.1.4 Monitor points

Per la valutazione quantitativa dei risultati e il confronto tra le diverse simulazioni, sono stati definiti punti di monitoraggio distribuiti all'interno del dominio di calcolo. Questi rappresentano un elemento fondamentale dell'analisi poiché consentono di registrare l'evoluzione temporale delle principali variabili di interesse in corrispondenza di posizioni significative della geometria.

La scelta e la disposizione dei punti di monitoraggio non è arbitraria, ma deriva direttamente dalla configurazione sperimentale adottata per la validazione delle simulazioni numeriche. In particolare, i monitor points sono stati collocati in corrispondenza delle posizioni dei sensori di concentrazione installati sul *mock-up* della piattaforma offshore in scala ridotta (1:10), utilizzato nelle prove sperimentali in galleria del vento descritte precedentemente (4.1.1). Questa scelta consente un confronto diretto e coerente tra i risultati numerici e i dati sperimentali ottenuti durante i rilasci controllati, permettendo una valutazione quantitativa dell'affidabilità dei modelli di simulazione adottati.

L'approccio segue la metodologia suggerita da Moscatello [49], in cui i monitor points vengono collocati in zone caratteristiche da differente grado di ventilazione e confinamento, al fine di catturare l'eterogeneità del campo di concentrazione.

Nel presente lavoro sono stati posizionati 38 punti di monitoraggio distribuiti su tre livelli della piattaforma, come si vede in Figura 15:

- Livello superiore, in prossimità della sorgente di rilascio e in aree esposte al vento, per analizzare il *near field*;
- Livello intermedio, in corrispondenza delle passerelle e delle strutture parzialmente schermate, per valutare i fenomeni di ricircolo e stagnazione;
- Livello inferiore, nelle zone più protette e sottovento, dove è più probabile l'accumulo della nube.

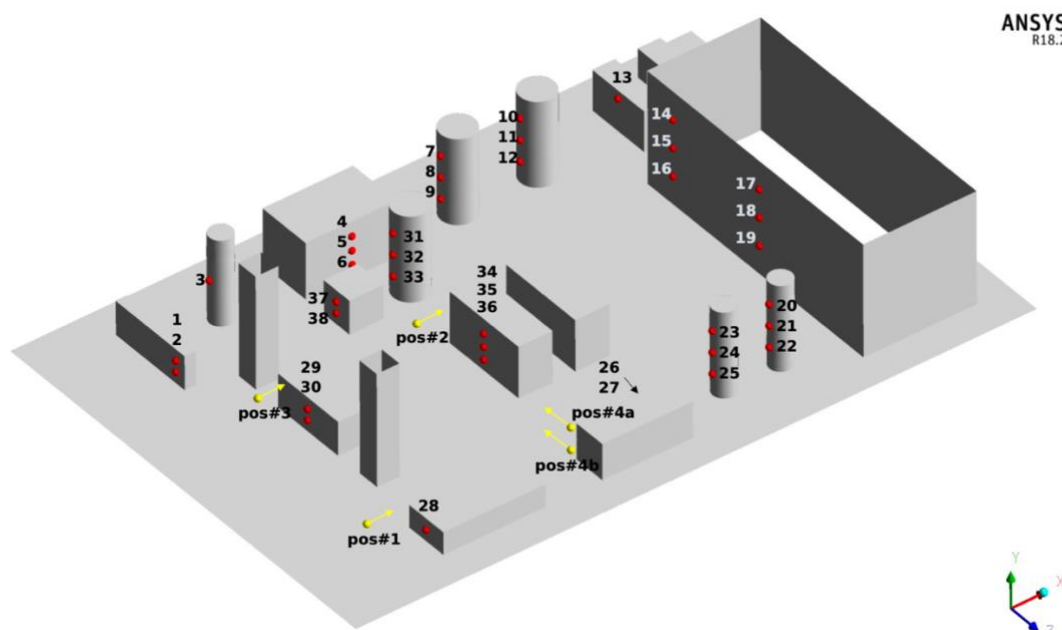


*Figura 15 - Rappresentazione grafica delle posizioni dei sensori del gas sul ponte della piattaforma (punti rossi) con i corrispondenti numeri di etichetta, nonché delle posizioni e direzioni di rilascio considerate nei casi di studio (punti gialli e frecce), nel caso seguente solo pos#1. [49]*

## 4.2 Impostazione dei modelli

Dopo aver definito gli scenari, il passo successivo consiste nella costruzione e configurazione dei modelli numerici nei software di calcolo selezionati per lo studio.

Ciascun software adotta una propria filosofia di modellazione, un differente livello di complessità e un diverso grado di interazione con l'utente. Per questo motivo, impostazione dei modelli è stata condotta secondo criteri comuni di base con le opportune personalizzazioni richieste dalle specificità di ogni codice.

L'obiettivo di questo capitolo è di descrivere come ciascun software sia stato configurato per riprodurre gli scenari definiti nel capitolo precedente e fornire una valutazione critica delle differenze metodologiche, evidenziando limiti e punti di forza di ogni approccio in relazione al problema specifico preso in esame.

I passaggi completi di modellazione, comprensivi di geometrie, condizioni al contorno, parametri numerici e configurazioni di simulazione, sono riportati in APPENDICE A.

#### 4.2.1 Parametri caratteristici del rilascio e la loro implementazione nei modelli di simulazione

Un rilascio incidentale di CO<sub>2</sub> in ambiente offshore può essere descritto attraverso un insieme di parametri fisici, termodinamici e operativi che ne determinano l'evoluzione fluidodinamica e l'interazione con l'ambiente circostante. Tali parametri definiscono e condizioni iniziali del getto, il regime di rilascio e i meccanismi di dispersione della nube, e costituiscono quindi la base comune per l'impostazione dei diversi modelli di simulazione adottati nel presente lavoro.

Tra i principali parametri caratteristici del rilascio si contano:

- Lo stato termodinamico del fluido al punto di rilascio, definito da pressione, temperatura e fase (gassosa o liquida);
- La geometria del foro di perdita, in termini di diametro e orientamento, che influenza la portata e la struttura del getto;
- La tipologia di rilascio, distinguendo tra rilascio continuo, istantaneo o transitorio;
- La durata del rilascio, che determina l'evoluzione temporale dell'accumulo e della dispersione;
- La portata massica e la velocità iniziale del getto, derivate direttamente o indirettamente dalle condizioni di rilascio;
- Le condizioni ambientali, quali velocità e direzione del vento, temperatura ambiente e grado di turbolenza;
- La geometria del dominio e il livello di congestione strutturale, che influenzano la ventilazione e i fenomeni di ricircolo.

Sebbene tali parametri descrivano univocamente il fenomeno fisico del rilascio, i diversi software di simulazione adottano approcci differenti nella loro implementazione. In particolare, ciascun codice utilizza un proprio livello di semplificazione e di modellazione dei fenomeni fisici, con conseguenze dirette sulla rappresentazione del rilascio e sulla comparabilità dei risultati. Per questo motivo, è fondamentale chiarire in che modo ciascun parametro venga effettivamente utilizzato nei diversi strumenti di calcolo.

La Tabella 7 riassume i principali parametri caratteristici del rilascio e il modo in cui essi sono implementati nei tre software utilizzati.

Tabella 7 - Parametri caratteristici del rilascio e la loro implementazione nei diversi strumenti di simulazione

| Parametro                                    | PHAST                  | FLACS                  | ANSYS Fluent         |
|----------------------------------------------|------------------------|------------------------|----------------------|
| Pressione e temperatura al punto di rilascio | Input diretto          | Input diretto          | Input diretto        |
| Fase del fluido                              | Definita internamente  | Definita dall'utente   | Definita dall'utente |
| Geometria del foro (diametro)                | Input diretto          | Input diretto          | Input diretto        |
| Orientamento del rilascio                    | Semplificato           | Input diretto          | Input diretto        |
| Tipo di rilascio                             | Continuo               | Continuo               | Stazionario          |
| Durata del rilascio                          | Transitorio (600 s)    | Transitorio (600 s)    | Non applicabile      |
| Portata massica                              | Calcolata internamente | Calcolata internamente | Imposta o derivata   |
| Velocità iniziale del getto                  | Calcolata internamente | Calcolata internamente | Risolta CFD          |
| Raffreddamento del fluido                    | Correlazioni           | Modello semplificato   | Risolta CFD          |
| Turbolenza                                   | Modelli empirici       | RANS                   | RANS                 |
| Effetti degli ostacoli                       | Non modellati          | Modellati              | Modellati            |
| Ventilazione e ricircoli                     | Semplificati           | Modellati              | Modellati            |
| Dettaglio spaziale                           | Basso                  | Medio                  | Alto                 |
| Costo computazionale                         | Molto basso            | Medio                  | Alto                 |

Le differenze evidenziate in tabella devono essere tenute in considerazione nell'interpretazione dei risultati e nel confronto tra i diversi approcci di modellazione. In particolare, esse giustificano le eventuali discrepanze osservate tra le simulazioni, che non dono imputabili esclusivamente ai valori dei parametri di ingresso, ma anche al diverso livello di dettaglio fisico con cui ciascun software rappresenta il fenomeno del rilascio e della dispersione.

## 4.3 PHAST

Per lo studio delle conseguenze di un rilascio di CO<sub>2</sub> è stato creato un caso studio all'interno dell'ambiente di simulazione DNV PHAST. L'obiettivo dell'analisi è valutare la dispersione della nube di CO<sub>2</sub> e stimare le distanze di impatto in corrispondenza di specifiche soglie di concentrazione e tossicità.

Il software utilizza le condizioni di rilascio definite nella sezione 4.1.3 come input per la simulazione degli scenari incidentali considerati. L'approccio adottato è basato su modelli semi-empirici che consentono di stimare la portata di rilascio; l'espansione iniziale del getto e la successiva dispersione della nube di funzione delle condizioni operative e ambientali assegnate.

Dal punto di vista della modellazione, PHAST tratta in modo analogo i rilasci in fase gassosa e quelli in fase liquida. In entrambi i casi, il rilascio è descritto come una perdita continua attraverso un foro di diametro assegnato e le differenze tra i due scenari sono introdotte esclusivamente attraverso le condizioni termodinamiche del fluido al punto di rilascio. Il software non risolve in modo esplicito la fisica locale del *leak* né i fenomeni transitori associati alla formazione del getto nelle immediate vicinanze del foro, ma utilizza correlazioni consolidate per stimare la portata e le caratteristiche iniziali del flusso rilasciato.

Nel caso del rilascio liquido, gli effetti di espansione e raffreddamento del fluido sono trattati in maniera semplificata, senza una risoluzione dettagliata dei fenomeni locali. Analogamente, per il rilascio gassoso, la struttura del getto nelle prime fasi di sviluppo non viene risolta esplicitamente, ma rappresentata attraverso modelli di tipo ingegneristico. Di conseguenza, PHAST fornisce una descrizione efficace degli aspetti macroscopici del rilascio, quali la stima delle distanze di impatto associate a specifiche soglie di concentrazione, ma risulta meno adatto alla caratterizzazione dettagliata del *near field*.

Le soglie di concentrazione adottate come criteri di valutazione (IDHL e limiti di letalità NORSOK (1.4.3)), sono state implementate in PHAST come livelli di contorno (*contour levels*), consentendo di rappresentare graficamente l'estensione delle zone di rischio per entrambi gli scenari di rilascio. Questa impostazione rende possibile un confronto

coerente tra i casi gassoso e liquido, pur nella consapevolezza delle semplificazioni intrinseche al modello adottato.

## 4.4 FLACS

Il software FLACS, sviluppato da *Gexcon*, è stato utilizzato per la modellazione della dispersione di CO<sub>2</sub> in ambiente offshore. Si tratta di un codice CFD tridimensionale ampiamente impiegato in ambito di *process safety*, in grado di simulare dispersioni, esplosioni e rilasci di gas tossici o infiammabili in geometrie complesse. Grazie alla sua architettura numerica ottimizzata per ambienti industriali, FLACS rappresenta uno degli strumenti di riferimento per le analisi di sicurezza di piattaforme offshore e impianti a rischio di incidente rilevante.

Il codice adotta una discretizzazione cartesiana basata sul concetto di porosità distribuita, che consente di rappresentare strutture geometricamente complesse senza la necessità di generare mesh conformi ai solidi. Questo approccio riduce significativamente i tempi di pre-processing e permette di modellare in modo realistico l'interazione tra il flusso e gli ostacoli, mantenendo al contempo un elevato grado di accuratezza nella risoluzione dei campi di velocità e concentrazione. Questa caratteristica rende FLACS particolarmente adatto per lo studio di dispersioni di CO<sub>2</sub> in ambienti confinati o parzialmente ventilati, come i moduli di processo delle piattaforme offshore.

### Preparazione della geometria e costruzione della griglia

La geometria tridimensionale della piattaforma è stata importata nel modulo di pre-processing di FLACS, esclusivamente gli elementi strutturali rilevanti per la ventilazione e per la dispersione del gas, così da ridurre la complessità computazionale senza compromettere la rappresentatività fisica del dominio.

La generazione della mesh è stata inizialmente condotta con *AutoGrid*, generatore automatico di mesh integrato nel software. Tuttavia, i risultati preliminari hanno mostrato una risoluzione insufficiente nelle zone a forte gradiente di concentrazione. Per questo motivo, la modellazione è stata successivamente ripetuta utilizzando *QuickGrid* che ha consentito di controllare direttamente la grandezza delle celle, migliorare la risoluzione locale e ottenere una rappresentazione più fedele del campo di concentrazione.

Al fine di evidenziare il livello di dettaglio geometrico adottato nella modellazione con FLACS, in Figura 16 è riportata una rappresentazione della geometria tridimensionale del dominio di calcolo utilizzato.

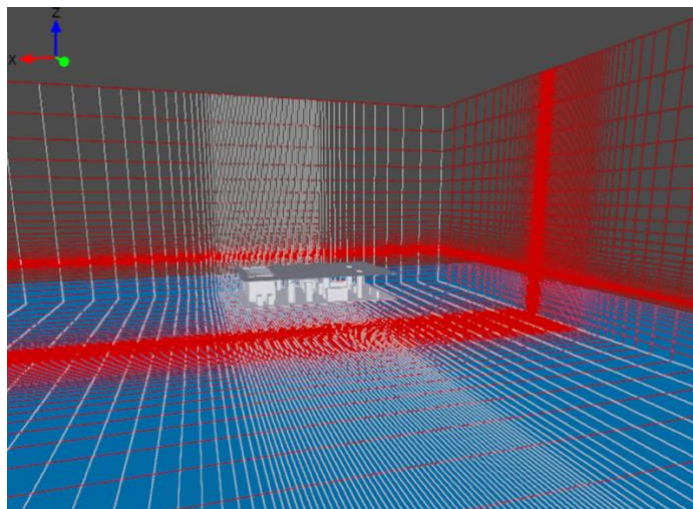


*Figura 16 - Griglia di calcolo per modello FLACS*

#### 4.4.1 Modellazione del rilascio gassoso

Le simulazioni in fase gassosa consentono di verificare la qualità del dominio numerico e la risposta del codice a un rilascio non bifase. Entrambe le simulazioni sono state eseguite mantenendo costanti la geometria, le condizioni ambientali e le caratteristiche del foro di rilascio.

È bene precisare che, sebbene il comportamento fluidodinamico e dispersivo del gas rimanga invariato, l'analisi è stata condotta definendo la CO<sub>2</sub> come sostanza inerte all'interno del codice di calcolo. Questa configurazione è stata utilizzata per validare il campo di moto e il campo di concentrazione all'interno della piattaforma, consentendo di verificare la stabilità numerica del modello CFD e la coerenza dei risultati in termini di dispersione.

La simulazione con CO<sub>2</sub> inerte è stata pertanto assunta come riferimento per la valutazione dei risultati e per le successive analisi di confronto.

#### 4.4.2 Modellazione del rilascio liquido

La modellazione di un rilascio di CO<sub>2</sub> in fase liquida costituisce una delle sfide principali per l'impiego di FLACS nelle analisi di dispersione. A differenza dei rilasci gassosi, per i quali FLACS è pienamente validato, la CO<sub>2</sub> liquida o supercritica presenta fenomeni complessi quali flashing, formazione di ghiaccio secco, variazioni termodinamiche rapide e comportamento multifase. FLACS, nella sua configurazione attuale, non dispone di un modello multifase dedicato in grado di risolvere simultaneamente le transizioni tra fase liquida, vapore e solido. Per questo motivo è necessario adottare un approccio ingegneristico semplificato, ampiamente discusso nel webinar Gexcon dedicato alla modellazione della CO<sub>2</sub> liquida/supercritica. [50]

L'obiettivo principale di tale strategia non è riprodurre nel dettaglio la fisica del jet bifase, ma fornire condizioni di rilascio coerenti con la fisica dominante, ovvero la portata di massa e la velocità iniziale, per poi lasciare a FLACS la simulazione di dispersione della nube gassosa risultante. Questo permette di ottenere risultati realistici in termini di concentrazioni, estensione della nube e impatti tossici, pur riconoscendo i limiti termodinamici del software.

##### Approccio ingegneristico al rilascio liquido

La Figura 17 sintetizza in modo schematico l'approccio ingegneristico adottato per rappresentare un rilascio di CO<sub>2</sub> liquida all'interno di FLACS. Il fenomeno, come già detto, viene suddiviso in due parti distinte: la prima, a sinistra della figura, riguarda il rilascio liquido puro, mentre la seconda parte, a destra, rappresenta la sorgente gassosa equivalente utilizzata come *boundary condition* all'interno del modello CFD. Lo schema evidenzia chiaramente che la transizione liquido-gas non viene risolta dal codice numerico, bensì trattata come un processo istantaneo localizzato al foro. In questo modo FLACS riceve un input fisicamente coerente e può gestire la dispersione della nube gassosa nella geometria offshore, mentre il calcolo del flusso in uscita e del *flashing* è gestito esternamente tramite formule ingegneristiche.

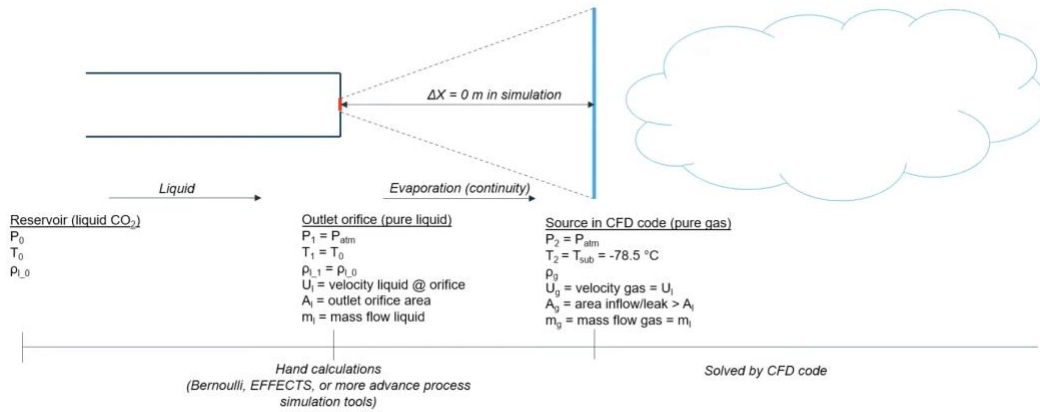


Figura 17 - Schema concettuale del rilascio liquido con approccio ingegneristico [50]

In prima approssimazione, ipotizzando un rilascio da tubazione (senza battente di liquido), il rilascio viene trattato come puro liquido al foro, caratterizzato da pressione iniziale  $P_0$ , pressione a valle pari alla pressione ambiente  $P_1$ , temperatura iniziale  $T_0$ , densità liquida  $\rho_l$  e l'area del foro  $A_1$ . La velocità di efflusso viene stimata tramite l'equazione di Bernoulli:

$$v_{ideale} = \sqrt{\frac{2 \cdot (P_0 - P_1)}{\rho_l}}$$

Corretta con il coefficiente di scarico  $C_d$  per tenere conto delle perdite localizzate:

$$v_l = C_d \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot (P_0 - P_1)}{\rho_l}}$$

La portata massica del liquido è quindi calcolabile come:

$$\dot{m}_l = \rho_l \cdot A_l \cdot v_l$$

Queste grandezze vengono considerate conservative e rappresentano il punto di partenza dell'intera modellazione. È importante sottolineare che tale formulazione non cattura la possibile comparsa di un regime bifase nel foro né i fenomeni termodinamici non lineari legati all'espansione rapida, ma costituisce un compromesso largamente accettato nelle analisi di sicurezza orientate alla dispersione. L'assunzione è cautelativa in quanto eventuali vaporizzazioni ridurrebbero la portata di efflusso, riducendo la magnitudo dell'incidente.

Il passo successivo consiste nel convertire il rilascio liquido in un getto gassoso equivalente. Si assume che il liquido, una volta espulso, subisca un *flashing* quasi istantaneo e venga completamente vaporizzato. La sorgente gassosa viene quindi definita imponendo:

- Stessa velocità del getto liquido:  $v_g = v_l$ ;
- Stessa portata massica:  $\dot{m}_g = \dot{m}_l$ ;
- Pressione ambiente:  $P_g = P_{atm}$ ;
- Temperatura equivalente fissata alla temperatura di sublimazione della CO<sub>2</sub>:  
 $T_g = -78,5^\circ\text{C}$ .

Una volta calcolata la densità del gas  $\rho_g$ , l'area della sorgente gassosa viene determinata imponendo la conservazione della portata massica:

$$A_g = \frac{\dot{m}_l}{\rho_g \cdot v_l}$$

Questa procedura garantisce che la nube dispersa simulata da FLACS rifletta correttamente la massa rilasciata nell'unità di tempo, evitando la sovrastima tipica dei modelli che trattano il rilascio liquido come un getto gassoso ad alta pressione.

In Tabella 8 sono riportati i principali parametri caratteristici della sorgente equivalente.

Tabella 8 - Parametri caratteristici della sorgente equivalente di CO<sub>2</sub> liquida per modello FLACS

| Grandezza                      | Simbolo     | Valore | Unità          |
|--------------------------------|-------------|--------|----------------|
| Portata massica                | $\dot{m}_g$ | 36,42  | kg/s           |
| Velocità del getto equivalente | $u_g$       | 49,07  | m/s            |
| Area del getto equivalente     | $A_g$       | 0,27   | m <sup>2</sup> |
| Diametro del getto equivalente | $d_g$       | 0,59   | m              |

Rimangono tuttavia alcune criticità: la termodinamica dell'espansione istantanea non viene calcolata, non è possibile rappresentare né la formazione né la deposizione del ghiaccio secco e non si presenta il fenomeno della riduzione della temperatura che potrebbe produrre danni alle persone e alle strutture. In compenso, la concentrazione del

gas disperso, parametro determinante per le valutazioni di rischio tossico e per la QRA, viene riprodotta con un livello di affidabilità adeguato alle esigenze della presente analisi.

In definitiva, questo approccio consente di integrare le condizioni di rilascio liquido nel modello CFD garantendo coerenza fisica e confrontabilità con il corrispondente scenario gassoso. Pur con i limiti intrinseci, questa metodologia rappresenta una soluzione praticabile e riconosciuta per studiare l'impatto della CO<sub>2</sub> liquida rilasciata dagli impianti, consentendo una valutazione robusta delle distanze di danno e delle concentrazioni in atmosfera.

## 4.5 Ansys Fluent

Il software Ansys Fluent è stato utilizzato per lo sviluppo e l'applicazione di un modello CFD personalizzato, basato sul concetto di *Source Box* [49], adattato alla simulazione di rilasci di anidride carbonica (CO<sub>2</sub>) in ambiente offshore, nel caso di rilascio gassoso e basato sul concetto di sorgente equivalente accoppiata a un modello di dispersione multifase nel caso di rilascio liquido. L'obiettivo principale di questa parte di lavoro è stato quello di riprodurre in modo accurato il comportamento fluidodinamico e termodinamico del rilascio, includendo gli effetti di espansione, raffreddamento e possibile transizione di fase del fluido (miscela bifase), nel caso di rilascio in fase liquida. A differenza degli strumenti industriali come PHAST o FLACS, Ansys Fluent consente una gestione diretta delle equazioni di stato, delle proprietà termofisiche e dei modelli di turbolenza, rendendolo particolarmente adatto per studi di validazione e analisi di dettaglio.

### 4.5.1 Modellazione del rilascio gassoso

Per la modellazione dei rilasci in fase gassosa si è scelto di adottare il modello *Source Box Accident Model* (SBAM), sviluppato da Moscatello [49] per i rilasci ad alta pressione di gas metano e successivamente rielaborato per gas pesanti come la CO<sub>2</sub>. Questo approccio consente di rappresentare in modo accurato la fase iniziale del rilascio, caratterizzata da forti gradienti di pressione e temperatura, senza dover risolvere l'intero dominio con un'unica simulazione CFD.

Il fenomeno complessivo viene scomposto in due sottodomini, modellati separatamente ma fisicamente connessi:

- Il dominio di rilascio, denominato *Source Box* (SB), che rappresenta la ragione immediatamente adiacente al foro e in cui il flusso è soggetto a forti gradienti di pressione, temperatura e densità;
- Il dominio di dispersione, che descrive l'evoluzione del getto dopo la zona supersonica, in regime subsonico e turbolento, fino all'interazione con l'ambiente esterno e con la geometria della piattaforma.

In Figura 18 mostra lo schema logico del modello proposto, mettendo in evidenza la sua articolazione in due fasi distinte.

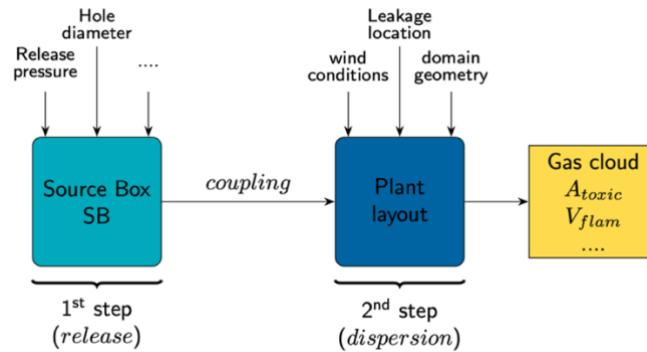


Figura 18 - Schema logico del modello SBAM [49]

### Approccio Source Box

All'interno della Source Box il flusso di CO<sub>2</sub> è trattato come compressibile e governato dalle equazioni di Navier-Stokes in forma transiente, risolte in condizioni di alta pressione. La superficie di uscita dalla *Source Box* fornisce i profili di velocità, temperatura e concentrazione che vengono utilizzati come condizioni al contorno per la simulazione della dispersione nel dominio esteso.

Questa metodologia consente di ridurre significativamente il costo computazionale rispetto a un modello monolitico, mantenendo comunque un'elevata accuratezza nella descrizione del getto nella zona di rilascio e permettendo al contempo un controllo preciso sulle condizioni iniziali della simulazione CFD principale.

Dopo la risoluzione del dominio SB, i dati numerici relativi al profilo del rilascio (portata massica e velocità) sono stati elaborati mediante codice *MATLAB* apposito. Il codice

consente di interpolare spazialmente i risultati della *Source Box* e di esportare i campi di variabili in un formato compatibile con il preprocessore di Ansys Fluent. In questo modo SB viene inserita direttamente nella geometria della piattaforma come condizione di ingresso del flusso, evitando discontinuità numeriche e garantendo la conservazione dei bilanci di massa e di energia tra i due domini.

L'implementazione del collegamento tra *MATLAB* e Ansys Fluent ha permesso di effettuare un accoppiamento stabile e controllato tra il dominio SB e il dominio di dispersione, analogamente a quanto proposto da Moscatello [49] ma adattato al comportamento termodinamico peculiare della CO<sub>2</sub>, che presenta una forte variazione di densità e possibili transizioni di fase anche in condizioni lievemente sopra-critiche.

#### Configurazione numerica e modello fisico

Le simulazioni sono state condotte utilizzando il modello *Real Gas* di Ansys Fluent, con equazioni di stato basate sulla formulazione di Peng-Robinson<sup>3</sup>, appropriata per la CO<sub>2</sub> nelle condizioni di alta pressione considerate. [51]

Le proprietà termofisiche della CO<sub>2</sub> sono state importate da database NIST e definite come funzioni della temperatura e della pressione.

Il modello di turbolenza adottato è di tipo *RANS  $k-\omega$  Standard*, in quanto rappresenta un buon compromesso tra stabilità numerica e capacità di descrivere la diffusione turbolenta nelle regioni di miscelamento. Per le simulazioni transitorie è stato utilizzato uno schema implicito a passo variabile, con un criterio di convergenza basato su residui inferiori a  $10^{-5}$  per le variabili principali.

La discretizzazione spaziale è stata oggetto di uno studio di indipendenza dalla griglia, che ha permesso di definire la dimensione minima delle celle nella regione del getto. Le zone caratterizzate da forti gradienti sono state discretizzate con celle più fitte, mentre nelle aree periferiche è stato adottato un progressivo allargamento della griglia per ottimizzare il tempo computazionale.

---

<sup>3</sup> Equazione in grado di descrivere in modo accurato il comportamento dei gas reali in un ampio intervallo di pressioni e temperature. Rispetto ad altre equazioni di stato cubiche, la PR-EOS introduce un termine di attrazione correttivo che migliora la predizione delle proprietà termodinamiche vicino al punto critico, mantenendo al contempo una forma matematica relativamente semplice.

### Impostazione del dominio e condizioni al contorno

Il dominio di calcolo della SB è stato dimensionato in modo da garantire che, ai confini della SB, gli effetti di compressibilità fossero trascurabili. La mesh del dominio SB è di tipo ibrido, con celle esagonali più fitte in prossimità del foro di rilascio e progressivo allargamento verso l'esterno.

Le condizioni al contorno alla sorgente sono definite in termini di pressione totale, temperatura e frazione di massa, mentre ai confini della SB è imposto un profilo di pressione statica ambiente. Il dominio di dispersione, più esteso, è invece caratterizzato da condizioni di vento definite  $0^\circ$ ,  $45^\circ$  e  $90^\circ$  rispetto all'asse del rilascio, riproducendo le tre configurazioni di ventilazione considerate.

### Criticità nell'utilizzo di SBAM

L'implementazione del modello *Source Box* ha permesso di ottenere una descrizione accurata e coerente della zona di rilascio, mantenendo un equilibrio tra fedeltà fisica e sostenibilità numerica. Questo approccio si è dimostrato efficace anche nel caso della  $\text{CO}_2$ , che presenta un comportamento termodinamico più complesso dovuto alla maggiore densità, alla forte variazione delle proprietà fisiche e alla possibilità di transizione di fase.

Tuttavia, l'approccio SBAM presenta alcune limitazioni intrinseche che ne condizionano la generalizzabilità. Il limite principale riguarda la semplificazione del campo di rilascio, che nella *Source Box* viene trattato come un dominio separato, ipotizzando che l'interfaccia tra zona di rilascio e zona di dispersione sia caratterizzata da un profilo di flusso stazionario e già pienamente sviluppato. In realtà, nei rilasci reali tale equilibrio può non essere raggiunto, e parte della dinamica iniziale del getto può influenzare significativamente la fase di dispersione.

Infine, l'applicazione del modello della  $\text{CO}_2$  introduce ulteriori sfide: la forte dipendenza delle proprietà termodinamiche dalla temperatura e dalla pressione, l'eventuale presenza di ghiaccio secco e le transizioni di fase liquide/gas comportano un'elevata sensibilità numerica e richiedono un'accurata definizione delle condizioni al contorno e dell'equazione di stato. Questi aspetti rendono necessaria una calibrazione specifica del metodo per i fluidi non ideali, che può limitarne l'utilizzo in analisi parametriche automatiche o in scenari fortemente transitori. [52]

#### 4.5.2 Modellazione del rilascio liquido

La modellazione del rilascio liquido in ANSYS Fluent è stata sviluppata adottando un approccio gerarchico che separa in modo netto la descrizione del rilascio primario dalla simulazione della dispersione atmosferica. Questa scelta metodologica si basa sull'approccio proposto dall'articolo di Lou et al. [28], che costituisce uno dei contributi più rilevanti e sistematici sul tema della simulazione CFD della dispersione di getti di CO<sub>2</sub> liquida. Tale lavoro è stato scelto come riferimento principale poiché vi è una validazione e una pratica applicabilità ingegneristica con particolare attenzione alla stima delle distanze di danno e all'analisi della sensibilità alla definizione della sorgente.

L'idea di fondo è che i fenomeni che avvengono immediatamente a valle del punto di rilascio – decompressione attraverso il foro, espansione immediata del liquido, transizione di fase e solidificazione parziale – si sviluppino su scale spaziali e temporali estremamente ridotte rispetto a quelle caratteristiche della dispersione su scala impiantistica. Risolvere direttamente tali processi all'interno di un dominio CFD atmosferico richiederebbe l'introduzione di modelli bifase complessi con un costo computazionale elevato.

Per questo motivo, nel presente lavoro tali fenomeni non vengono risolti esplicitamente nel dominio CFD, ma vengono inglobati in un modello di sorgente equivalente (*source model*) risolta all'interno di MATLAB e che riporta gli input da inserire nel software CFD, mentre la simulazione in ANSYS Fluent è dedicata esclusivamente alla fase di dispersione atmosferica, che rappresenta la parte più rilevante dal punto di vista della sicurezza.

##### Interpretazione fisica del rilascio e suddivisione in zone

Un aspetto centrale dell'approccio è la suddivisione concettuale del rilascio in zone fisiche, ciascuna caratterizzata da fenomeni dominanti differenti. Tale suddivisione, illustrata in Figura 19, consente di chiarire il ruolo di ciascuna regione nel determinare le proprietà del getto che alimenta la dispersione.

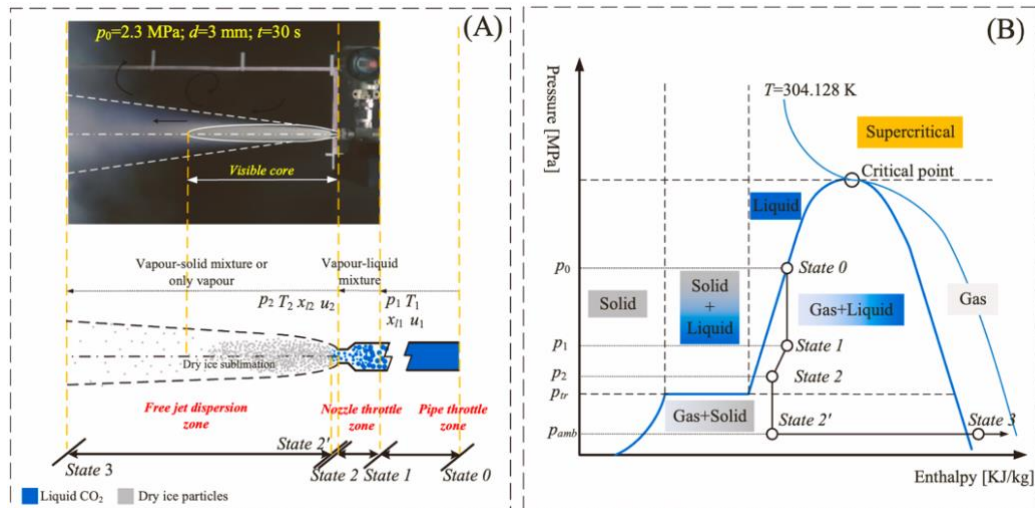


Figura 19 - (A) Dispersione a getto di CO<sub>2</sub> liquida; (B) diagramma di fase di pressione ed entalpia della CO<sub>2</sub>. [28]

Nella prima regione, che comprende il tratto di flusso nel tubo (stato 0  $\rightarrow$  stato 1), la CO<sub>2</sub> fluisce dal volume di stoccaggio verso il foro. La pressione diminuisce progressivamente a causa delle perdite per attrito e delle residenze locali. A seconda delle condizioni operative, il fluido può già trovarsi in condizioni bifase, con una frazione di vapore che aumenta al diminuire della pressione.

Il passaggio attraverso il foro (stato 1  $\rightarrow$  stato 2) rappresenta una regione critica del rilascio. Qui il fluido subisce una rapida espansione, raggiungendo condizioni di flusso strozzato. La forte riduzione di pressione induce un'intensa vaporizzazione del liquido e una brusca accelerazione del flusso, con la formazione di una miscela bifase ad alta velocità.

A valle del foro, nella zona di sotto-espansione (stato 2  $\rightarrow$  stato 2'), il getto bifase si trova in condizioni fortemente fuori equilibrio rispetto all'ambiente. L'ulteriore espansione causa un marcato raffreddamento del fluido: una parte della CO<sub>2</sub> liquida vaporizza assorbendo calore, mentre la frazione residua solidifica, dando origine a particelle di ghiaccio secco. In questa regione il flusso evolve rapidamente verso una miscela vapore-solido.

Infine, nella zona di dispersione del getto libero (stato 2'  $\rightarrow$  stato 3), il getto entra in contatto con l'aria ambiente. In questa fase iniziano i fenomeni di *entrainment* e miscelazione e la nube evolve secondo meccanismi tipici della dispersione atmosferica di

gas densi. È questa l'unica regione che viene risolta esplicitamente in ANSYS Fluent nel presente lavoro.

### Modellazione della sorgente equivalente (*source model*)

La definizione della sorgente equivalente rappresenta l'elemento più delicato dell'intero approccio di modellazione. L'intensità della sorgente è qui intesa come la portata massica di CO<sub>2</sub> che, una volta completata l'espansione iniziale e i processi di cambiamento di fase, alimenta effettivamente la dispersione atmosferica. Una stima non corretta di tale grandezza può condurre a errori significativi nella previsione dell'estensione della nube e delle distanze di danno.

Per descrivere in modo coerente il rilascio primario, è stato sviluppato un modello termodinamico esterno al CFD, implementato in ambiente MATLAB e basato sull'utilizzo della libreria *CoolProp* per il calcolo delle proprietà termofisiche della CO<sub>2</sub>. Il modello segue una sequenza di stati idealizzati, coerente con la suddivisione fisica del rilascio introdotta in precedenza, e consente di determinare le proprietà del getto equivalente da imporre come condizioni al contorno nel dominio CFD.

Quando la CO<sub>2</sub> si trova in condizioni di equilibrio tra più fasi (liquido-vapore o solido-vapore), le proprietà termodinamiche della miscela possono essere espresse come combinazione pesata delle proprietà delle singole fasi. Indicando con  $x$  la frazione massica della fase dispersa, la densità, l'entalpia e l'entropia della miscela possono essere scritte come:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} &= \frac{x_v}{\rho_v} + \frac{x_l}{\rho_l} \quad oppure \quad \frac{1}{\rho} = \frac{x_v}{\rho_v} + \frac{x_s}{\rho_s} \\ s &= x_v s_v + x_l s_l \quad oppure \quad s = x_v s_v + x_s s_s \\ h &= x_v h_v + x_l h_l \quad oppure \quad h = x_v h_v + x_s h_s \end{aligned}$$

con il vincolo:

$$x_v + x_l = 1 \quad oppure \quad x_v + x_s = 1$$

Dove i pedici  $v$ ,  $l$  ed  $s$  indicano rispettivamente le fasi vapore, liquida e solida. Queste relazioni costituiscono la base termodinamica del modello e vengono utilizzate per determinare lo stato del fluido nei diversi punti del rilascio.

Il primo stadio del rilascio, che collega il volume di stoccaggio all'ingresso del foro (da stato 0 a stato 1) , viene modellato come un flusso stazionario in condotto. Assumendo assenza di scambi termici con l'ambiente, variazioni di quota trascurabili e un processo sufficientemente rapido, il flusso può essere considerato ad entalpia costante. Di conseguenza, valgono le equazioni di conservazioni della massa e dell'entalpia:

$$\rho_0 u_0 A_0 = \rho_1 u_1 A_1$$

$$h_0 = h_1$$

Dove il pedice 0 indica lo stato nel serbatoio e il pedice 1 lo stato all'ingresso del foro.

Il passaggio attraverso il foro (da stato 1 a stato 2) è modellato come un processo di espansione rapida, idealmente isentropico, durante il quale il fluido accelera fino a raggiungere condizioni di flusso critico. L'equazione di bilancio energetico lungo la direzione del flusso può essere scritta come:

$$h_1 + \frac{1}{2}u_1^2 = h_2 + \frac{1}{2}u_2^2$$

Dove lo stato 2 rappresenta l'uscita dal foro. In questa regione, il fluido subisce una forte riduzione di pressione e una parziale vaporizzazione, con conseguente formazione di miscela bifase. La formazione massica di vapore allo stato 2 può essere stimata a partire dal bilancio entropico della miscela:

$$x_v = \frac{s_{mix,1} - s_{l,2}}{s_{v,2} - s_{l,2}}$$

Che consente di determinare la composizione della miscela immediatamente a valle del foro.

La portata massica all'uscita è quindi calcolata come:

$$\dot{m}_2 = \rho_2 u_2 A_2$$

In condizioni di flusso critico, tale portata rappresenta il valore massimo consentito dalla geometria del foro e dalle condizioni termodinamiche del fluido.

A valle del foro (dallo stato 2 allo stato 2'), la brusca decompressione induce una rapida espansione del getto (*underexpanded jet*), accompagnata da un intenso raffreddamento. Una parte della CO<sub>2</sub> liquida vaporizza assorbendo calore, mentre la frazione residua

solidifica. Il bilancio energetico tra vaporizzazione e solidificazione può essere espresso come:

$$G_{v,2'} h_{l,v} = G_{s,2'} h_{l,s}$$

Da cui è possibile stimare la frazione massica di solido allo stato 2':

$$x_{s'} = \frac{G_{s,2'}}{G_{s,2'} + G_{g,2'}} = \frac{h_{l,g}}{h_{l,s} + h_{l,g}}$$

In questa regione si assume che l'aria non venga ancora significativamente considerata nel getto e che la dinamica sia dominata dalla conservazione della quantità di moto. Sotto questa ipotesi, le caratteristiche cinematiche del getto equivalente possono essere stimate a partire da:

$$p_2 A_2 = G_2 u_2 = G_{2'} u_{2'} = 4 G_{2'} \frac{G_{2'}}{\pi d_{2'}^2 \rho_{2'}}$$

Che consente di definire le caratteristiche cinematiche del getto all'ingresso del dominio di dispersione.

L'intera procedura di calcolo segue una sequenza logica ben definita, che parte dalle condizioni iniziali di pressione e temperatura e conduce alla determinazione della portata massica effettiva, della temperatura e delle proprietà del getto equivalente. Tale sequenza è sintetizzata nel flowchart riportato in Figura 20, che costituisce il collegamento operativo tra il modello termodinamico esterno e la simulazione CFD.

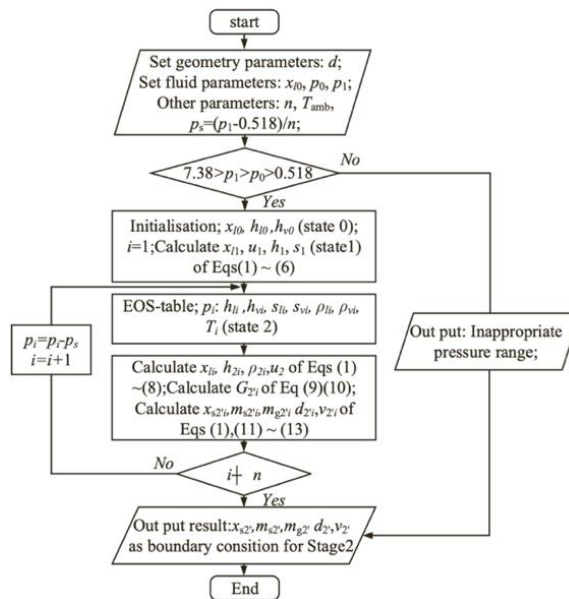


Figura 20 - Flowchart computazionale della source model [28]

Il codice creato è riportato in APPENDICE B.

L'applicazione del modello di sorgente descritto consente di ricondurre il complesso rilascio primario di CO<sub>2</sub> liquida a un insieme coerente di grandezze equivalenti, che rappresentano le condizioni di ingresso del getto nella fase di dispersione atmosferica. Tali parametri costituiscono l'output finale della modellazione termodinamica implementata in ambiente MATLAB e vengono successivamente utilizzati come condizioni al contorno nel modello CFD sviluppato in ANSYS Fluent.

In Tabella 9 sono riportati i principali parametri caratteristici della sorgente equivalente.

*Tabella 9 - Parametri caratteristici della sorgente equivalente di CO<sub>2</sub> liquida per modello ANSYS Fluent*

| Grandezza                      | Simbolo            | Valore | Unità |
|--------------------------------|--------------------|--------|-------|
| Portata massica totale         | $\dot{m}_{2',tot}$ | 28,8   | kg/s  |
| Frazione massica di vapore     | $x_{2',v}$         | 0,52   | -     |
| Frazione massica di solido     | $x_{2',s}$         | 0,48   | -     |
| Portata massica fase gassosa   | $\dot{m}_{2',gas}$ | 14,93  | kg/s  |
| Portata massica fase solida    | $\dot{m}_{2',sol}$ | 13,87  | kg/s  |
| Velocità del getto equivalente | $u_{2'}$           | 77,7   | m/s   |
| Diametro del getto equivalente | $d_{2'}$           | 0,30   | m     |

#### Implementazione del rilascio in ANSYS Fluent

Una volta definite le proprietà del getto equivalente mediante la sorgente equivalente, la simulazione della dispersione di CO<sub>2</sub> viene effettuata in ANSYS Fluent assumendo un rilascio stazionario. Questa scelta è coerente con l'obiettivo del presente lavoro che non è la descrizione dell'evoluzione temporale del rilascio, ma l'analisi delle configurazioni più gravose dal punto di vista della sicurezza e l'identificazione delle aree soggette ad accumulo.

Il rilascio di CO<sub>2</sub> inizialmente in fase liquida viene rappresentato mediante un approccio multifase semplificato, basato sull'utilizzo del *Discrete Phase Model* (DPM). In tale

impostazione, la dispersione viene descritta considerando due attributi distinti ma accoppiati:

- Una fase continua, costituita dalla CO<sub>2</sub> in fase gassosa miscelata con l'aria;
- Una fase discreta, costituita dalle particelle solide di CO<sub>2</sub> (ghiaccio secco) generate a seguito della sotto-espansione.

Questa scelta consente di catturare in modo efficace l'inerzia iniziale del rilascio, la deposizione gravitazionale delle particelle e i fenomeni di trasferimento di massa ed energia tra fase discreta e fase continua, senza ricorrere a modelli bifase completamente accoppiati, che risulterebbero difficili da calibrare e numericamente instabili.

Le particelle solide vengono iniettate nel dominio CFD attraverso il modello di distribuzione granulometrica di Rosin-Rammler, ampiamente utilizzato per rappresentare popolazioni di particelle generate da processi di frammentazione rapida. I parametri di iniezione (portata massica, velocità iniziale, temperatura e distribuzione dimensionale) sono definiti in modo coerente con i risultati della sorgente equivalente.

In particolare, la portata massica complessiva delle particelle solide è pari alla frazione solida calcolata allo stato 2', mentre la temperatura iniziale è fissata pari alla temperatura di sublimazione della CO<sub>2</sub> (~ -78,5 °C). La velocità iniziale delle particelle è assunta uguale a quella del getto equivalente, determinata mediante il bilancio di quantità di moto nella zona di sotto-espansione.

Le informazioni standard disponibili in ANSYS Fluent non sono sufficienti a descrivere in modo accurato i processi termodinamici coinvolti nella dispersione di CO<sub>2</sub> a bassa temperatura, in particolare per quanto riguarda:

- La variazione delle proprietà termofisiche di CO<sub>2</sub> con la temperatura;
- La sublimazione delle particelle solide e il conseguente trasferimento di massa alla fase continua;
- La coerenza tra il *source model* esterno e le condizioni di iniezione nel CFD.

Per questo motivo, alcune proprietà dei materiali sono state ridefinite rispetto ai valori standard del software, al fine di rappresentare correttamente il comportamento della CO<sub>2</sub>

sia in fase gassosa sia in fase solida. Le principali proprietà adottate nel modello CFD sono riportate in Tabella 10.

*Tabella 10 - Proprietà dei materiali*

| Materiale                                     | Vapore                   | Ghiaccio secco |
|-----------------------------------------------|--------------------------|----------------|
| Densità, $\rho$ [ $kg/m^3$ ]                  | Gas ideale               | 1562           |
| Conducibilità termica, $k$ [ $W/mK$ ]         | 0,0145                   | 0,086          |
| Calore specifico, $C_p$ [ $J/kgK$ ]           | $C_p(T)$                 | 54,55          |
| Viscosità, $\mu$ [ $kg/ms$ ]                  | $1,37507 \times 10^{-5}$ | /              |
| Calore di sublimazione, $h_{sub}$ [ $kJ/kg$ ] | /                        | 573            |

In particolare, per la fase gassosa la densità è stata trattata mediante equazione di stato di gas ideale, mentre il calore specifico a pressione costante è stato definito come funzione della temperatura. Le proprietà di viscosità dinamica e conducibilità termica sono state mantenute costanti, in quanto il loro contributo risulta secondario rispetto agli effetti associati alla variazione di densità e capacità termica nell'intervallo di temperatura analizzato.

La fase solida di CO<sub>2</sub> è stata modellata come materiale distinto, caratterizzato da densità, conducibilità termica e calore latente di sublimazione assegnati sulla base di dati di letteratura. Tale fase non è presente nei database standard del software ed è stata pertanto introdotta come materiale personalizzato (APPENDICE C).

Per tenere conto di tali aspetti, sono state implementate delle UDF (*User Defined Functions*) che consentono di introdurre nel modello numerico relazioni personalizzate per le proprietà della CO<sub>2</sub> e per i termini di sorgente di massa ed energia, in coerenza con le proprietà riportate in Tabella 10.

La fase gassosa di CO<sub>2</sub> viene trattata come un fluido a densità variabile, le cui proprietà dipendono dalla temperatura e dalla composizione locale. In particolare, il calore specifico a pressione costante  $C_p$  è definito mediante una funzione a tratti, derivata da correlazioni di letteratura, che consente di coprire un ampio intervallo di temperatura [53]:

$$C_p(T) = \begin{cases} 1231,28 + 2,31042T & T < 273 \\ 1000 \cdot \left[ a_1 e^{-\left(\frac{T-b_1}{c_1}\right)^2} + a_2 e^{-\left(\frac{T-b_2}{c_2}\right)^2} + a_3 e^{-\left(\frac{T-b_3}{c_3}\right)^2} + a_4 e^{-\left(\frac{T-b_4}{c_4}\right)^2} \right] & 273 \leq T \leq 374 \\ 2822,48 - 2,83834T & T > 374 \end{cases}$$

Dove  $a_i$ ,  $b_i$  e  $c_i$  sono coefficienti costanti definiti in Tabella 11. Questa formulazione consente di descrivere in modo continuo il comportamento termico della CO<sub>2</sub> anche in prossimità delle basse temperature tipiche del rilascio criogenico.

Al di sotto del punto critico, la pressione di saturazione viene invece calcolata come segue [54]:

$$p_{sat}(T) = 0,518 \cdot e^{\left\{ \left[ z_1 \cdot \left( 1 - \frac{T}{216,592} \right) + z_2 \cdot \left( 1 - \frac{T}{216,592} \right)^{1,9} + z_3 \cdot \left( 1 - \frac{T}{216,592} \right)^{2,9} \right] \frac{216,592}{T} \right\}}$$

Dove  $z_i$  sono coefficienti costanti definiti in Tabella 11. Questa espressione è utilizzata all'interno delle UDF per valutare le condizioni di equilibrio tra fase solida e fase gassosa e per determinare la direzione del trasferimento di massa.

Tabella 11 - Coefficienti per le proprietà della CO<sub>2</sub>

| i | 1          | 2         | 3          | 4      |
|---|------------|-----------|------------|--------|
| a | 0,06409    | 0,103     | 1,896      | 0,2505 |
| b | 318,9      | 324,5     | 329,1      | 334,4  |
| c | 5,577      | 12,75     | 375,8      | 32,15  |
| z | -14,740846 | 2,4327015 | -5,3061778 | /      |

La UDF implementata sul software è riportata in forma integrale in APPENDICE D.

La fase continua viene risolta tramite le equazioni di Navier-Stokes per un flusso turbolento a densità variabile. La densità della CO<sub>2</sub> è in funzione della temperatura e della composizione locale. L'accoppiamento tra fase continua e fase discreta avviene attraverso i termini di sorgente di massa, quantità di moto ed energia derivanti dalla sublimazione e dall'inerzia delle particelle.

L'intero processo di modellazione – dalla definizione della sorgente equivalente alla simulazione CFD della dispersione – è organizzato in modo coerente e sequenziale. Il

flowchart riportato in Figura 21 sintetizza l'interazione tra modello termodinamico esterno, iniezione DPM, UDF per proprietà e trasferimenti e soluzione delle equazioni di flusso del dominio CFD.

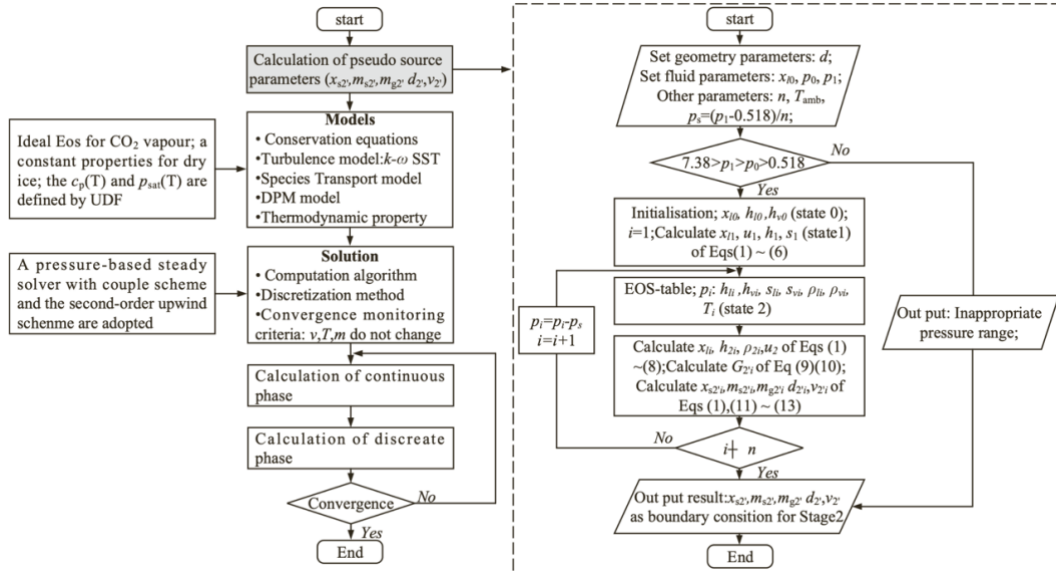


Figura 21 - Flowchart computazionale completo [28]

### Considerazioni critiche

L'approccio adottato per la modellazione del rilascio di CO<sub>2</sub> liquida in ANSYS Fluent si inserisce nel solco degli studi più recenti sulla dispersione di getti criogenici ad alta pressione e riprende in modo consapevole il framework proposto da *Lou et al.* [28]. Il punto di forza principale di questa metodologia risiede nella chiara separazione tra i fenomeni dominanti nel *near-field*, governati dalla termodinamica del rilascio, e quelli che caratterizzano la dispersione atmosferica su scala impiantistica, correttamente risolta mediante CFD.

La definizione della sorgente equivalente rappresenta l'elemento più sensibile dell'intero processo di simulazione. Tuttavia, tale sensibilità non costituisce un limite intrinseco del modello, bensì una caratteristica fisica del problema: le distanze di danno risultano fortemente dipendenti dalla sorgente equivalente effettiva, indipendentemente dal codice numerico utilizzato. In questo contesto, l'adozione di un modello termodinamico dedicato, implementato esternamente al solver CFD e basato su proprietà accurate della CO<sub>2</sub>, consente di ridurre in modo significativo l'arbitrarietà nella definizione delle condizioni di ingresso, migliorando la coerenza fisica e la riproducibilità dei risultati.

I risultati ottenuti mostrano che, una volta fissata in modo consistente la sorgente equivalente, la simulazione CFD è in grado di descrivere con elevato livello di dettaglio i meccanismi di dispersione, accumulo e diluizione della nube, anche in presenza di geometrie complesse e condizioni di ventilazione non uniformi. In linea con quanto riportato dalla letteratura, l'incertezza associata alla regione di espansione immediatamente a valle del foro non compromette la qualità delle previsioni sulle distanze di danno, che sono governate principalmente dall'evoluzione del getto e dalla sua interazione con l'ambiente circostante.

Rispetto a strumenti di tipo ingegneristico, l'approccio CFD adottato consente di superare l'ipotesi di dispersione unidimensionale, permettendo di analizzare scenari più realistici in cui la geometria, la direzione del vento e i fenomeni di confinamento giocano un ruolo determinante.

Dal punto di vista metodologico, l'impostazione generale del modello di rilascio liquido riprende la struttura proposta da Lou et al. [28], in particolare per quanto riguarda la separazione tra la fase di rilascio primario e la successiva fase di dispersione atmosferica, nonché l'utilizzo del concetto di sorgente equivalente per rappresentare in modo semplificato i fenomeni di espansione istantanea e formazione di fase solida. Il modello è stato però interamente ricostruito e implementato in modo autonomo nel presente lavoro.

In particolare, a differenza del caso di studio di riferimento, il modello è stato applicato a scala reale e non in una configurazione semplificata o ridotta; inoltre, la dispersione è stata analizzata introducendo una geometria complessa a valle del rilascio, in grado di influenzare direttamente il campo di moto e l'evoluzione della nube. A ciò si aggiunge la considerazione esplicita delle condizioni ambientali esterne, in particolare del vento, e della loro interazione con la sorgente e con gli ostacoli presenti nel dominio.



## 5 ANALISI DEI RILASCI DI CO<sub>2</sub> IN FASE GASSOSA

Il presente capitolo è dedicato all'analisi dei risultati relativi ai rilasci di CO<sub>2</sub> in fase gassosa, ottenuti mediante le simulazioni numeriche descritte nei capitoli precedenti. Gli scenari considerati, le condizioni di rilascio e l'impostazione dei modelli CFD sono quelli definiti nel Capitolo 4 e non vengono qui ripetuti, al fine di concentrare l'attenzione sull'interpretazione dei risultati e sul confronto tra i diversi approcci di modellazione.

L'obiettivo principale del capitolo è analizzare il comportamento della nube di CO<sub>2</sub> in condizioni di rilascio gassoso, mettendo in evidenza i meccanismi di dispersione, accumulo e persistenza in un contesto geometrico complesso. Particolare attenzione è rivolta agli effetti legati alla natura di gas denso della CO<sub>2</sub>, all'influenza della ventilazione e all'interazione con le strutture dell'impianto, che possono determinare distribuzioni spaziali delle concentrazioni significativamente disperse rispetto a quelle previste da modelli semplificati.

A partire dai risultati CFD, il capitolo propone un confronto sistematico tra i diversi strumenti di simulazione adottati, al fine di valutare come il livello di complessità modellistica influisca sulle grandezze di interesse per la sicurezza, quali l'estensione delle aree a concentrazione critica e i tempi di persistenza della nube. Infine, i risultati vengono analizzati alla luce dei criteri di vulnerabilità comunemente impiegati nella QRA, con l'obiettivo di valutare la coerenza e il grado di conservatività delle soglie normative in scenari caratterizzati da forte congestione strutturale.

### 5.1 Analisi dei risultati – PHAST

I risultati ottenuti con PHAST per il rilascio di CO<sub>2</sub> in fase gassosa consentono di analizzare la geometria della nube e l'evoluzione delle concentrazioni lungo la direzione di dispersione.

La Figura 22 riporta la massima estensione della nube di CO<sub>2</sub> calcolata con PHAST per diverse soglie di concentrazione. La rappresentazione planare mostra isolinee regolari e

simmetriche rispetto all'asse del rilascio, con un'estensione che diminuisce progressivamente all'aumentare della soglia considerata. Le concentrazioni più elevate risultano confinate in prossimità della sorgente, mentre le soglie inferiori si estendono maggiormente in direzione *downwind*, mantenendo una geometria semplice e prima di distorsioni laterali.

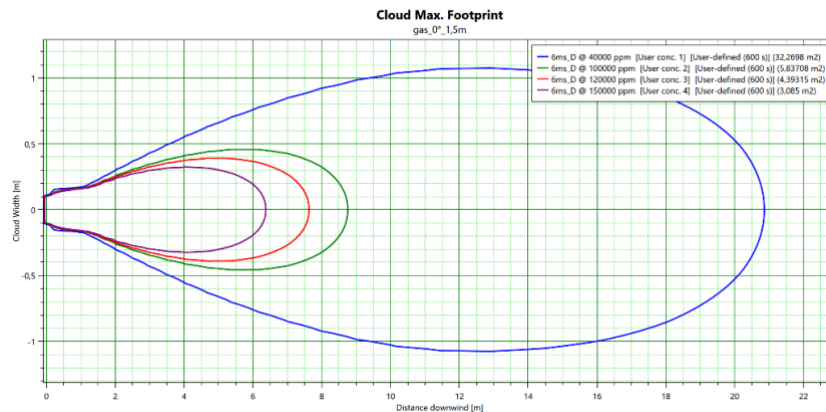


Figura 22 - Massima estensione della nube di  $CO_2$  - PHAST

Questa configurazione riflette una dispersione dominata dalla direzione principale del vento e dall'assenza di effetti di confinamento o interazione con ostacoli. La forma regolare delle footprint è indicativa di un campo di concentrazione mediato, nel quale la diluizione atmosferica avviene in modo uniforme lungo la direzione di propagazione della nube.

La Figura 23 mostra la vista laterale (*side view*) della nube associata a diverse concentrazioni di interesse. Il pennacchio si sviluppa prevalentemente in direzione orizzontale, con un decadimento verticale limitato e una rapida attenuazione delle concentrazioni con la distanza dalla sorgente. La distribuzione appare continua e priva di accumuli localizzati, senza evidenza di ristagni nelle regioni prossime al suolo.

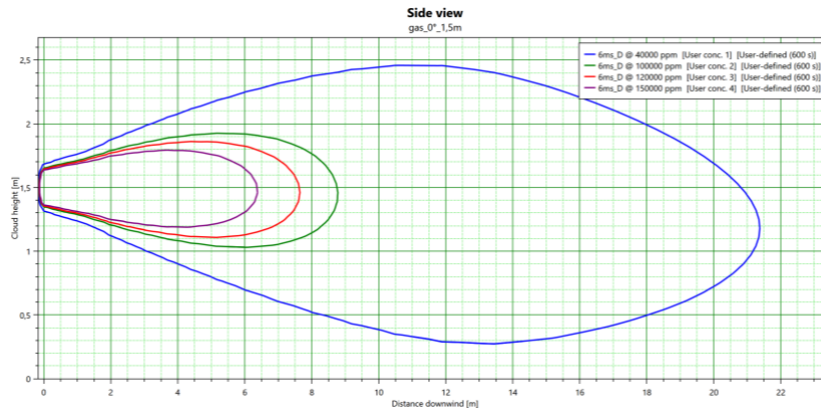


Figura 23 - Vista laterale della nube di CO<sub>2</sub> - PHAST

Dal punto di vista fisico, la vista laterale conferma che la dispersione è governata principalmente dalla spinta iniziale del getto e dalla diffusione turbolenta atmosferica. L'assenza di strutture geometriche nel modello si traduce in una nube che evolve secondo un profilo medio, senza la formazione di sacche concentrate o zone di permanenza prolungata.

La Figura 24 riporta infine l'andamento della concentrazione massima in funzione della distanza *downwind*. La curva evidenzia un decadimento monotono e regolare, con valori elevati limitati ai primi metri dal punto di rilascio e una riduzione rapida già a breve distanza. Le concentrazioni superiori alle soglie più critiche risultano confinate in un intervallo spaziale ristretto, mentre oltre tale regione la diluizione atmosferica porta a valori rapidamente decrescenti.

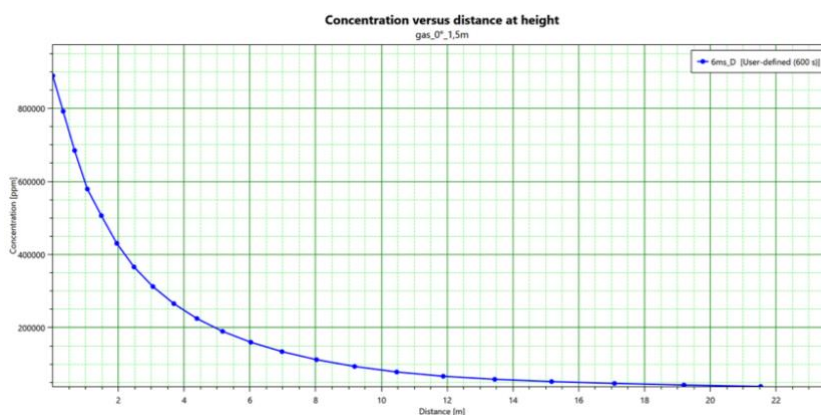


Figura 24 - Concentrazione massima in funzione della distanza - PHAST

Questo comportamento è coerente con un rilascio in fase gassosa in condizioni di vento moderato e con la natura integrale del modello adottato da PHAST, che restituisce una

descrizione macroscopica del fenomeno. Nel complesso, il software fornisce una rappresentazione fisicamente coerente e cautelativa della dispersione, adeguata alla stima delle distanze di impatto e delle aree di pericolo su scala globale.

## 5.2 Analisi dei risultati – FLACS

I risultati ottenuti con FLACS permettono di analizzare in dettaglio la dispersione tridimensionale della nube di CO<sub>2</sub> in presenza della geometria del sito, evidenziando l'influenza delle strutture sul campo di concentrazione.

La Figura 25 riporta le sezioni planari della concentrazione di CO<sub>2</sub> ottenute per le tre direzioni del vento considerate. Ciascuna sezione mostra la distribuzione spaziale della nube in condizioni stazionarie, evidenziando differenze significative nella geometria e nell'estensione delle zone a maggiore concentrazione.

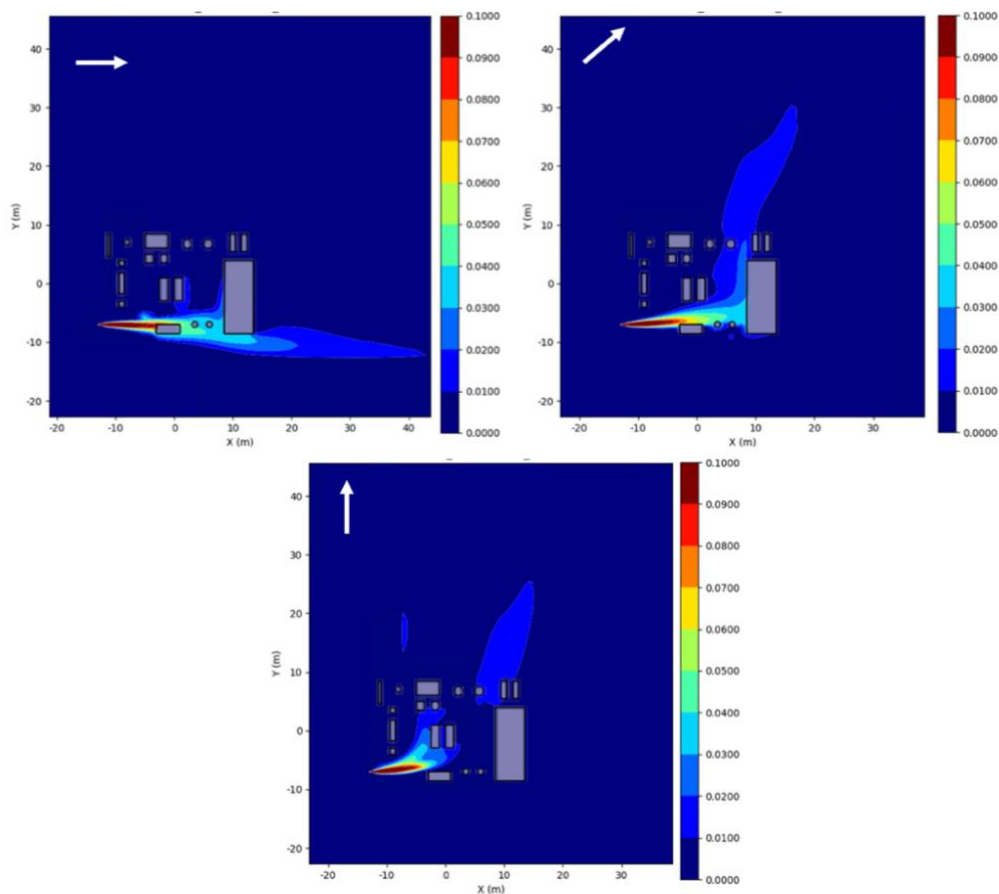


Figura 25 - Distribuzione della frazione molare CO<sub>2</sub>: a) configurazione vento 0°; b) configurazione vento 45°; c) configurazione vento 90° - FLACS

Nel primo caso, la nube si sviluppa prevalentemente lungo la direzione principale del vento, con una propagazione relativamente ordinata e un progressivo decadimento delle concentrazioni allontanandosi dalla sorgente. Le regioni a concentrazione più elevata risultano localizzate in prossimità del punto di rilascio e nelle aree immediatamente sottovento alle strutture, dove la ventilazione risulta parzialmente schermata.

Nel secondo caso, associato a una direzione di vento differente, la nube mostra una maggiore deviazione laterale e un'estensione verticale più marcata. L'interazione con le strutture genera zone di ricircolo e accumulo, in cui le concentrazioni rimangono elevate su porzioni più ampie del dominio. In questa configurazione, la dispersione risulta meno efficiente e maggiormente condizionata dagli effetti locali di confinamento.

Nel terzo caso, la direzione del vento favorisce una propagazione della nube lungo percorsi più complessi, con un'evidente frammentazione del pennacchio e la presenza di sacche concentrate in regioni schermate o poco ventilate. Le concentrazioni elevate non sono più limitate all'asse di rilascio, ma si distribuiscono in modo irregolare nel dominio, riflettendo una forte dipendenza dalla geometria e dall'orientamento del flusso.

Il confronto tra le tre configurazioni evidenzia come la direzione del vento rappresenti un parametro determinante nella definizione delle aree potenzialmente critiche. A parità di condizioni di rilascio, la distribuzione della CO<sub>2</sub> può variare in modo sostanziale, sia in termini di estensione spaziale della nube sia di localizzazione delle zone a maggiore concentrazione. Questo risultato sottolinea l'importanza di una descrizione tridimensionale del dominio, in grado di catturare deviazioni del flusso, ricircoli e accumuli locali.

La Figura 26 mostra la distribuzione della concentrazione molare di CO<sub>2</sub> nelle tre configurazioni di vento considerate, rappresentata in vista laterale.

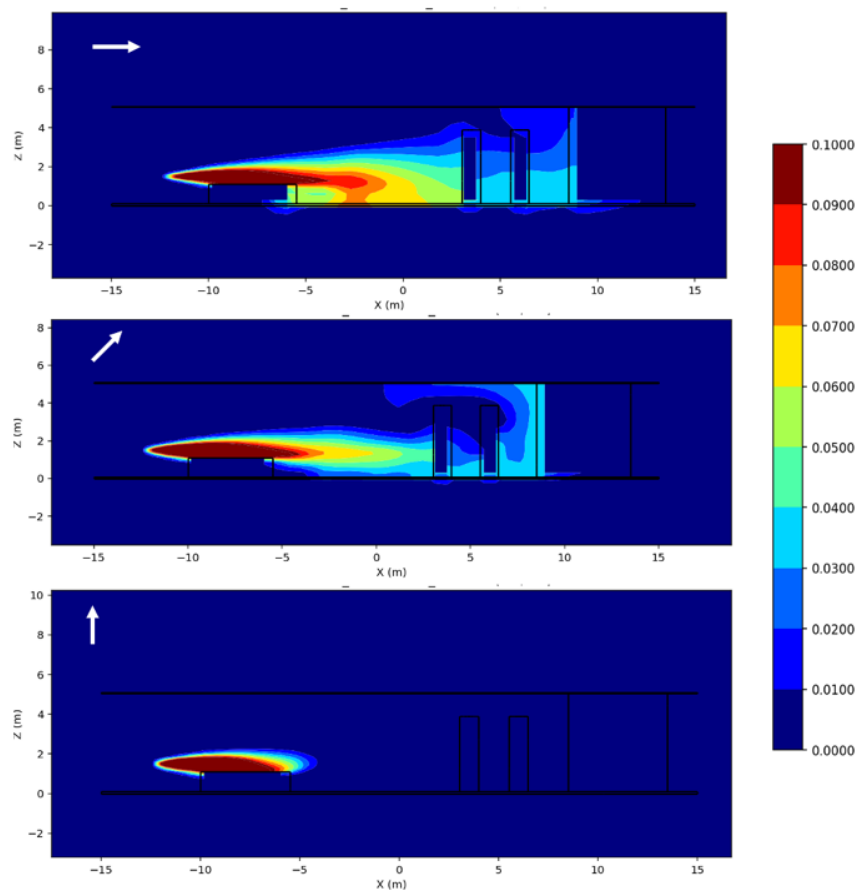


Figura 26 - Distribuzione della concentrazione di  $\text{CO}_2$  in vista laterale: a) configurazione vento  $0^\circ$ ; b) configurazione vento  $45^\circ$ ; c) configurazione vento  $90^\circ$  - FLACS

Dalle mappe di concentrazione è possibile osservare la presenza di zone di ricircolo generate dall'interazione tra il flusso e la geometria del dominio. In corrispondenza di queste regioni si evidenziano aree di accumulo di  $\text{CO}_2$ , dovute alla ridotta ventilazione locale. Inoltre, si osserva il fenomeno della caduta gravitazionale del gas pesante, che porta la  $\text{CO}_2$  a concentrarsi nelle regioni più basse del dominio. Questo comportamento è coerente con la fisica del problema e conferma che il modello numerico è in grado di rappresentare correttamente la dinamica di dispersione di un gas più pesante dell'aria.

Rispetto a un modello integrale come PHAST, che restituisce una dispersione mediata prevalentemente allineata alla direzione del vento, FLACS mette in evidenza una maggiore complessità del fenomeno. La presenza delle strutture e la risoluzione spaziale del campo di moto consentono di individuare criticità locali che non emergono da una rappresentazione semplificata, pur mantenendo una coerenza fisica globale nella propagazione della nube.

### 5.3 Analisi dei risultati – Ansys Fluent

I risultati ottenuti con Ansys Fluent permettono di osservare con maggiore dettaglio come la nube interagisca con le strutture, evidenziando effetti locali di deviazione, separazione e ricircolo che condizionano la distribuzione delle concentrazioni in prossimità degli ostacoli.

La Figura 27 riporta le sezioni planari della concentrazione di CO<sub>2</sub> ottenute per le tre direzioni del vento considerate. Ciascuna sezione mostra la distribuzione spaziale della nube in condizioni stazionarie, evidenziando differenze significative nella geometria e nell'estensione delle zone a maggiore concentrazione.

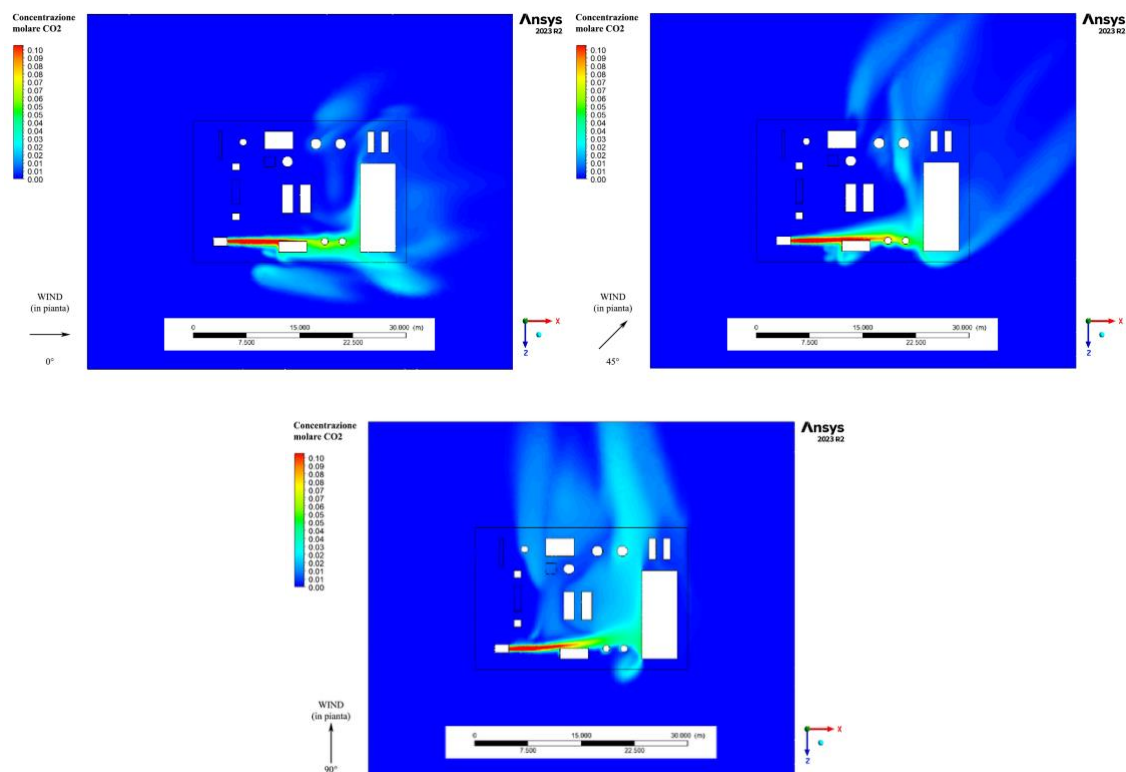


Figura 27 - Distribuzione della frazione molare CO<sub>2</sub>: a) configurazione vento 0°; b) configurazione vento 45°; c) configurazione vento 90° - Ansys Fluent

Per quel che riguarda la configurazione con vento allineato all'asse principale, la nube si sviluppa prevalentemente lungo la direzione del vento. L'aspetto più rilevante è il comportamento in prossimità delle strutture: la presenza del volume principale genera una zona di *wake* sottovento con separazione del flusso ai bordi e conseguentemente ispessimento locale della nube.

La configurazione con vento inclinato di  $45^\circ$  rispetto alla direzione del rilascio evidenzia una situazione più complessa: la nube non si limita a traslare lungo una sola direzione ma mostra una maggiore tendenza a ridistribuirsi attorno agli ostacoli. In particolare, l'interazione obliqua con il volume principale favorisce la formazione di vortici e corridoi di flusso tra le strutture (effetti di canalizzazione), che producono zone a gradiente più marcato: si osservano filamenti più concentrati che si sviluppano verso l'alto e, contemporaneamente, aree più diluite dove il getto viene rapidamente rimescolato.

La configurazione con vento trasversale rappresenta il caso più sensibile all'interazione fluido-struttura: la nube viene trascinata verso l'alto e si evidenziano chiaramente zone di accelerazione e separazione attorno ai bordi del volume principale. Il pennacchio assume una struttura più verticale e frammentata, con regioni in cui la  $\text{CO}_2$  viene convogliata lungo percorsi preferenziali e altre in cui tende a permanere maggiormente in prossimità delle strutture, coerentemente con la formazione di ricircoli nel lato sottovento. In questo scenario, più che l'estensione globale della nube, è la localizzazione delle aree di maggiore concentrazione a cambiare: le strutture deviano il flusso creando regioni d'accumulo e altre di rapida diluizione, che diventano determinanti nella lettura del rischio locale.

A completamento dell'analisi planare, sono state inoltre esaminate sezioni verticali del campo di concentrazione e di velocità, allo scopo di caratterizzare la struttura tridimensionale del getto e l'evoluzione verticale della nube di  $\text{CO}_2$  in fase gassosa.

Tali sezioni (Figura 28), estratte su piani passanti per l'asse del rilascio e per le principali direzioni di propagazione, consentono di evidenziare l'allargamento progressivo del pennacchio e la rapida perdita di coerenza del core iniziale ad alta velocità. Non si osserva una tendenza alla ricaduta gravitazionale della nube: la distribuzione verticale risulta dominata dalla dinamica del getto e dalla turbolenza indotta del vento e dalle strutture circostanti.

In particolare, le configurazioni con vento obliquo e trasversale mostrano un marcato inspessimento verticale della nube e una maggiore irregolarità del profilo di concentrazione, con la formazione di regioni localmente più concentrate anche a quote intermedie. Questo comportamento è indicativo di una dispersione tridimensionale complessa, che non può essere colta da approcci puramente monodimensionali o planari.

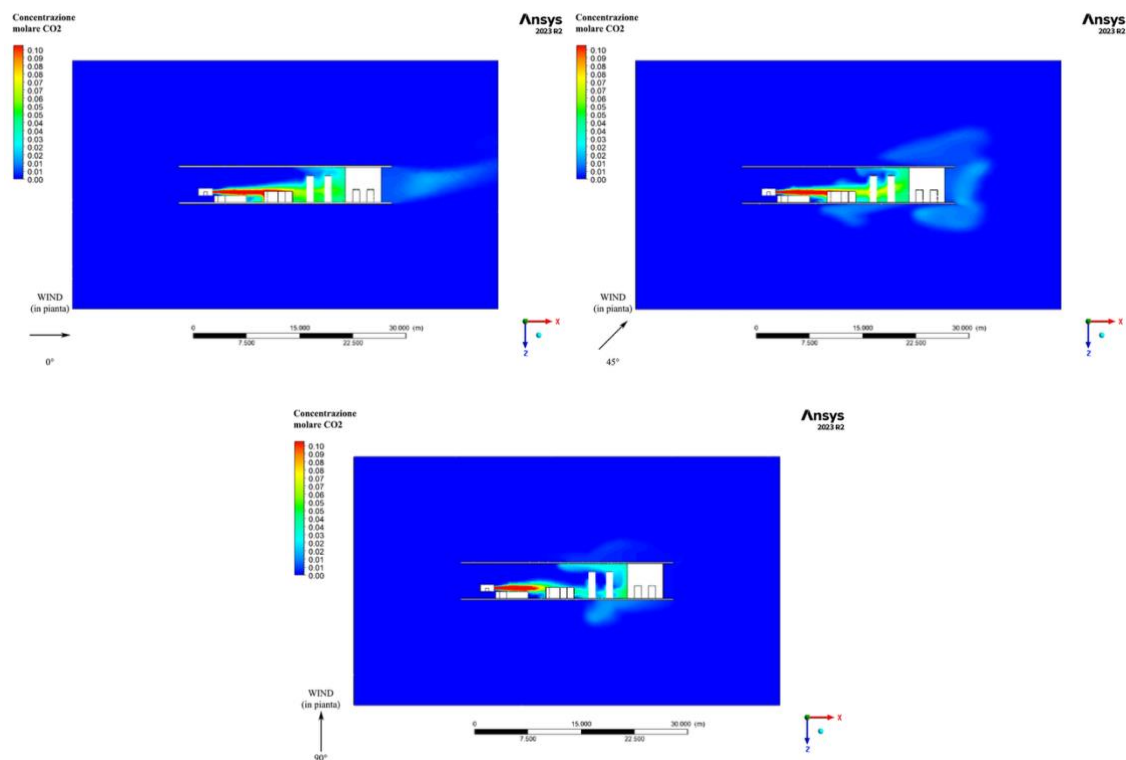


Figura 28 - Distribuzione della frazione molare CO<sub>2</sub> sul piano xy: a) configurazione vento 0°; b) configurazione vento 45°; c) configurazione vento 90° - Ansys Fluent

## 5.4 Sintesi dei risultati

I risultati relativi al rilascio di CO<sub>2</sub> in fase gassosa mostrano come la pericolosità dello scenario non sia riconducibile ad un singolo parametro, ma emerga dall'equilibrio tra intensità del rilascio, direzione del vento e interazione con le strutture. In prossimità del foro, il campo è dominato dall'elevata energia iniziale del getto, che determina velocità elevate e un rapido decadimento delle concentrazioni massime. Allontanandosi dalla sorgente, il comportamento della nube perde progressivamente coerenza assiale e diventa sempre più sensibile alle condizioni locali di ventilazione.

L'analisi dei diversi scenari evidenzia differenze rilevanti tra le configurazioni di vento. Il caso con vento obliquo è associato alla maggiore estensione della nube caratterizzata da concentrazioni elevate, mentre il vento trasversale favorisce una riduzione dei valori massimi lungo l'asse principale, a fronte però di una distribuzione più irregolare e

frammentata. Il vento allineato genera invece una dispersione più regolare e prevedibile, con una nube che si sviluppa prevalentemente lungo un corridoio ben definito.

Dal punto di vista della sicurezza, una lettura basata esclusivamente sui massimi puntuali risulta quindi insufficiente. L'introduzione di indicatori spaziali, quali l'area e il volume interessati da concentrazioni prossime o superiori alle soglie di riferimento, consente di distinguere tra scenari caratterizzati da elevate concentrazioni localizzate e scenari in cui la criticità è legata all'estensione della nube su porzioni più ampie del dominio.

Un aspetto particolarmente rilevante riguarda la permanenza della CO<sub>2</sub> nelle zone prossime alle strutture. La presenza di ostacoli può favorire la formazione di regioni di ricircolo e ristagno, nelle quali la ventilazione risulta ridotta e la nube tende a persistere più a lungo, aumentando il potenziale rischio operativo anche in assenza di concentrazioni di picco elevate.

Nel complesso, i risultati indicano che le condizioni di vento obliquo rappresentano lo scenario più sfavorevole per il rilascio gassoso, mentre le configurazioni trasversali introducono criticità locali legate alla geometria. Questa sintesi fornisce il quadro di riferimento per il successivo confronto tra i diversi approcci di modellazione.

## 5.5 Confronto dei modelli di simulazione

L'analisi integra i risultati ottenuti con FLACS, Fluent e PHAST, rappresentativi di tre differenti filosofie di calcolo: il modello poroso semi-integrale, la fluidodinamica computazionale tridimensionale e il modello integrato a parametri medi.

Questa impostazione consente di evidenziare non solo le differenze in termini di risultato numerico, ma anche le diverse modalità con cui ciascun software interpreta la fisica del fenomeno, offrendo una visione complessiva dell'affidabilità e dei limiti di ciascun approccio.

Prima di entrare nel confronto puntuale tra i singoli codici, è utile chiarire che il rilascio di CO<sub>2</sub> in fase gassosa rappresenta uno scenario relativamente diretto dal punto di vista modellistico. In questo caso, tutti e tre i software considerati consentendo di descrivere il rilascio senza ricorrere a modelli di sorgente esterni o a schematizzazioni aggiuntive legate a transizioni di fase.

Questa caratteristica rende il rilascio gassoso particolarmente adatto ad un confronto metodologico, poiché le differenze nei risultati possono essere ricondotte prevalentemente alla filosofia di modellazione, al trattamento della turbolenza e alla rappresentazione della geometria, piuttosto che a incertezze nella definizione della sorgente.

### 5.5.1 Approccio comparativo e criteri di analisi

Per garantire la confrontabilità dei risultati, tutti i modelli sono stati impostati sullo stesso scenario di rilascio gassoso con identiche condizioni al contorno e di rilascio. Nei codici CFD è stata definita una rete di 38 monitor points collocati lungo il dominio di calcolo destinati a registrare l'evoluzione temporale della concentrazione. I risultati di PHAST sono stati ricondotti a sensori equivalenti lungo l'asse principale della nube per consentire un confronto omogeneo.

Il confronto si sviluppa secondo un insieme di criteri comuni che combinano aspetti qualitativi e quantitativi, come mostra la Tabella 12.

*Tabella 12 - Criteri comuni per la confrontabilità dei modelli*

| Categoria                   | Aspetti considerati                                                           |
|-----------------------------|-------------------------------------------------------------------------------|
| Fisica del fenomeno         | Evoluzione temporale della concentrazione e distribuzione spaziale della nube |
| Rappresentazione geometrica | Trattamento della congestione e grado di dettaglio del dominio                |
| Modellazione numerica       | Scelta dei modelli di turbolenza, discretizzazione e stabilità                |
| Efficienza computazionale   | Tempi di calcolo e requisiti hardware                                         |
| Flessibilità del modello    | Grado di personalizzazione dei modelli fisici e numerici                      |
| Valutazione del rischio     | Possibilità di generare curve PROBIT e distanze di danno                      |

Come mostrato da Guddal (2025) [55], la confrontabilità tra strumenti con diversa filosofia richiede un equilibrio tra accuratezza fisica e applicabilità pratica. L'analisi qui condotta mira proprio a rappresentare questo equilibrio, valutando per ciascun codice non

solo il risultato numerico, ma anche il grado di coerenza interna e la capacità di descrivere realisticamente l'evoluzione della nube.

### 5.5.2 Analisi comparativa: FLACS e Fluent

Il primo confronto riguarda i codici CFD applicati allo stesso scenario di rilascio di CO<sub>2</sub> in un'area congestionata. Da ciascun monitor point sono state estratte le serie temporali di concentrazione, successivamente post-processate in MATLAB (APPENDICE E) per individuare il valore massimo di concentrazione durante l'evento. I risultati sono stati analizzati per tre diverse direzioni del vento – 0°, 45° e 90° rispetto all'asse principale del rilascio – per valutare l'influenza della direzione del flusso sul comportamento della nube e sulla coerenza tra i modelli.

Nei grafici di confronto (Figura 29, Figura 30 e Figura 32), le barre blu rappresentano i valori calcolati con Fluent, mentre le barre rosse indicano i corrispondenti risultati ottenuti con FLACS. Questi grafici mostrano, per ciascun sensore, la concentrazione massima registrata, permettendo di valutare la coerenza tra i due modelli sia in termini di distribuzione spaziale sia di intensità di picchi.

#### Vento a 0°

In condizioni di vento allineato al rilascio, entrambi i modelli individuano correttamente il percorso principale della nube lungo il corridoio di flusso che attraversa la zona congestionata.

I sensori centrali, situati lungo la direzione principale del getto, registrano valori di concentrazione simili, con differenze inferiori a 10-15%.

Come mostrato in Figura 29, i sensori centrali, posizionati lungo la direzione principale del getto, registrano valori di concentrazione simili, con differenze inferiori a 10-15%. ANSYS Fluent tende a prevedere concentrazioni leggermente più elevata nei primi sensori a valle della sorgente, mentre FLACS restituisce un profilo leggermente più smussato.

In questa configurazione, la dispersione risulta prevalentemente governata dalla direzione del vento e dal core del getto. Di conseguenza, le differenze tra i due modelli rimangono contenute e non emergono discrepanze significative nella forma complessiva della nube.

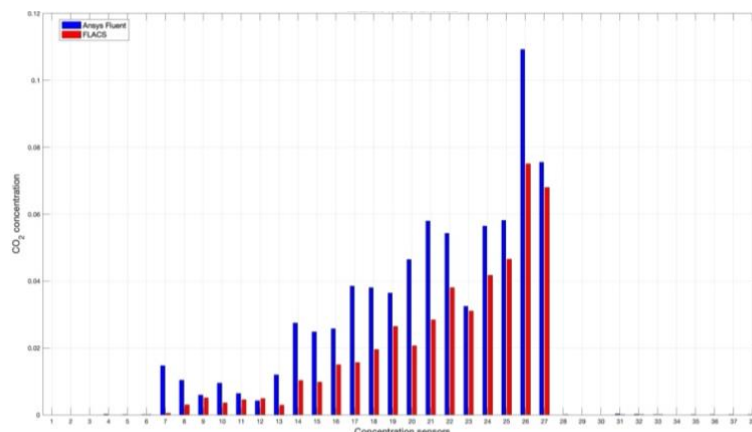


Figura 29 - Confronto concentrazione massima ai MP tra FLACS e Fluent; configurazione 0°

### Vento a 45°

Quando la direzione del vento è inclinata rispetto all'asse di rilascio, la dispersione della nube diventa più complessa e l'interazione con gli ostacoli risulta più marcata. Come emerge in Figura 30, entrambi i modelli intercettano correttamente il percorso principale del pennacchio, ma si osservano differenze più evidenti nei sensori collocati in prossimità delle strutture e nelle zone di ricircolo. In tali aree, Fluent prevede picchi di concentrazione più localizzati, mentre FLACS mostra una distribuzione più uniforme e diffusa.

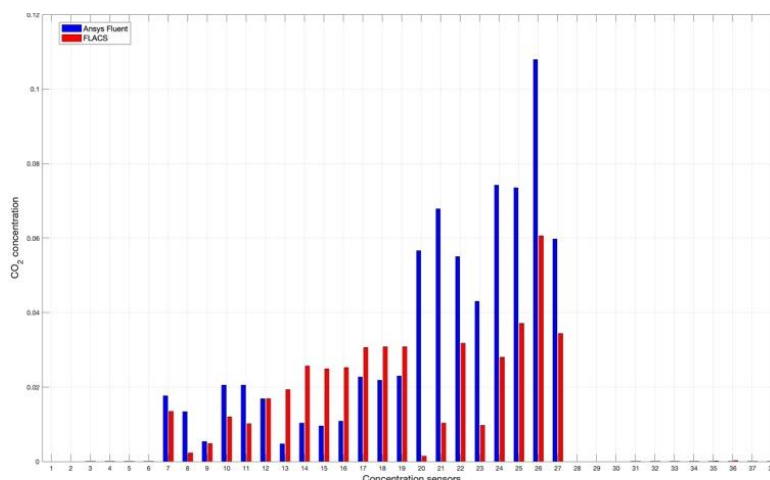


Figura 30 - Confronto concentrazione massima ai MP tra FLACS e Fluent; configurazione 45°

Le mappe di frazione molare di CO<sub>2</sub> (Figura 31) confermano che Fluent descrive più chiaramente le aree in prossimità di ostacoli, mentre FLACS ne fornisce una

rappresentazione più mediata ma coerente dal punto di vista della distribuzione della concentrazione.

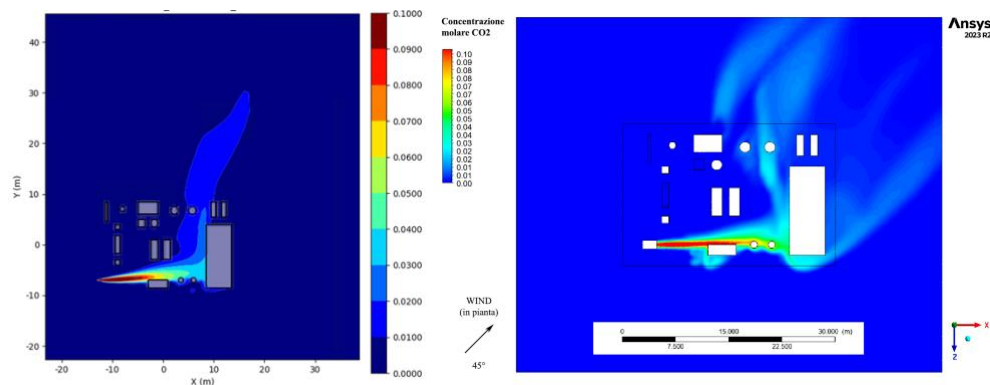


Figura 31 - Distribuzione della frazione molare di  $\text{CO}_2$  in configurazione  $45^\circ$ : a) modello FLACS; b) modello Fluent

### Vento a $90^\circ$

La configurazione con vento trasversale rappresenta il caso più critico in termini di confronto tra i modelli.

Come mostrato in Figura 32, i risultati ottenuti con Fluent evidenziano un accumulo marcato di  $\text{CO}_2$  nelle zone sottovento agli ostacoli principali, con gradienti di concentrazione netti e una distribuzione fortemente influenzata dalla geometria del sito. Al contrario, FLACS restituisce una dispersione più uniforme lungo il dominio, con una minore capacità di intercettare le zone di stagnazione e ricircolo.

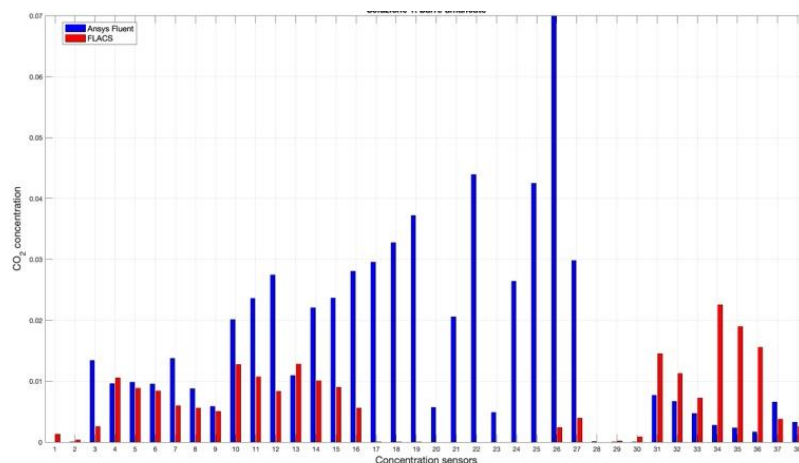


Figura 32 - Confronto concentrazione massima ai MP tra FLACS e Fluent; configurazione  $90^\circ$

Le differenze risultano particolarmente evidenti nei sensori posizionati lateralmente a valle della sorgente, dove FLACS tende a sottostimare, rispetto a Fluent, le concentrazioni locali e a sovrastimare la dispersione complessiva.

Le mappe di frazione molare di CO<sub>2</sub> (Figura 33) confermano tale comportamento: Fluent produce una nube più confinata e coerente con l'interazione fluido-struttura, mentre FLACS mostra una propagazione più diffusa, meno aderente alla reale morfologia del sito, tipica di un modello che descrive la geometria con una modellazione della porosità del dominio.

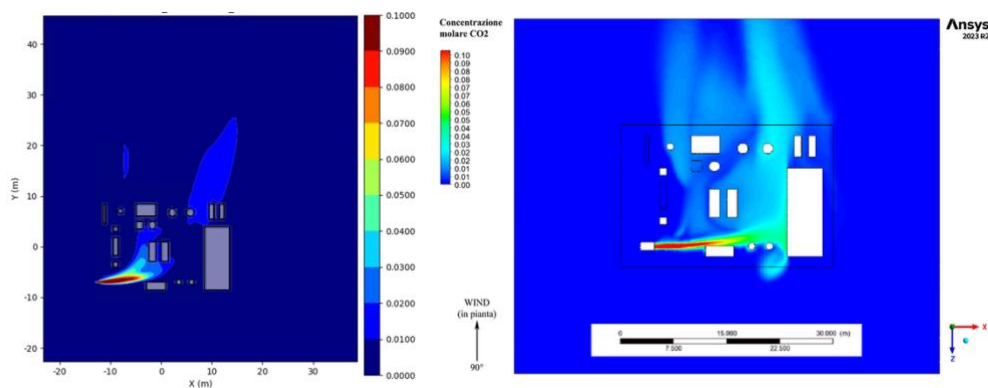


Figura 33 - Distribuzione della frazione molare di CO<sub>2</sub> in configurazione 90°: a) modello FLACS; b) modello Fluent

Nel complesso, per questa configurazione a 90°, i due software non mostrano un buon allineamento: la differenza nei profili di concentrazione è significativa e riflette direttamente le limitazioni geometriche di FLACS nella gestione di senari fortemente anisotropi e influenzati da ostacoli complessi.

#### Interpretazione delle differenze tra i modelli

Le differenze osservate nei tre scenari possono essere ricondotte principalmente al diverso trattamento della turbolenza e della geometria nei due codici.

FLACS utilizza una formulazione k-ε calibrata internamente per senari di rilascio e dispersione, mentre Fluent è stato impostato con il modello k-ω standard. Questa scelta influisce in modo significativo sul comportamento della simulazione nelle regioni prossime ai limiti solidi e alle strutture della geometria.

Il modello k-ω, infatti, descrive con maggiore accuratezza il gradiente turbolento in prossimità delle pareti, permettendo di catturare meglio la formazione di vortici e la

separazione del flusso attorno agli ostacoli; il modello k- $\epsilon$  tende invece a “mediare” tali effetti, fornendo una rappresentazione più stabile e smussata dei campi di velocità e concentrazione.

Di conseguenza, Fluent mostra una maggiore sensibilità locale alle discontinuità geometriche e alle regioni di shear, mentre FLACS restituisce un comportamento più regolare e diffuso, in linea con la filosofia semi-integrale del codice.

#### Considerazioni complessive sul confronto

Oltre al confronto puntuale sui monitor points, è interessante condurre un’analisi spaziale della forma e dell’estensione della nube di CO<sub>2</sub> nei diversi scenari di vento. Le distribuzioni planari (**Error! Reference source not found.**) confermano quanto osservato: nella configurazione trasversale, Fluent genera una nube ben confinata coerente con l’interazione fluido-struttura, mentre FLACS mostra una dispersione più ampia e irregolare, con scarsa aderenza alla reale morfologia del sito.

Diversamente, negli altri due scenari (vento a 0° e 45°), i risultati tra FLACS e Fluent risultano molto più coerenti. In particolare, con vento lungo l’asse di rilascio le nubi presentano una forma e un’estensione pressoché sovrapponibili e le differenze di concentrazione media rimangono entro margini ridotti.

La misura della distanza di decadimento sottosoglia (concentrazione <0,01 mol/mol) conferma tale andamento: mentre nella configurazione trasversale si osservano deviazioni importanti dovute al trattamento semplificato della geometria in FLACS, negli altri casi le differenze rimangono inferiori al 10%.

Dal punto di vista numerico, restano valide le considerazioni generali: Fluent garantisce una descrizione più accurata e fisicamente realistica del campo di moto, al prezzo di un costo computazionale maggiore, mentre FLACS offre maggiore semplicità e rapidità di esecuzione, risultando adatto per analisi di sicurezza preliminari o scenari standardizzati. Tuttavia, in configurazioni con geometrie complesse e flussi trasversali, la ridotta capacità di FLACS di rappresentare l’effetto schermante degli ostacoli può portare a risultati non affidabili e a una sottostima del rischio locale.

### 5.5.3 Estensione del confronto a PHAST

L'integrazione dei risultati ottenuti con DNV PHAST ha permesso di ampliare il confronto tra i diversi strumenti di simulazione, fornendo una visione più complessiva e coerente del fenomeno di dispersione. A differenza dei modelli CFD, PHAST adotta un approccio integrale monodimensionale, basato su ipotesi semplificate che non considerano la geometria e il confinamento dell'ambiente. Il rilascio è descritto come flusso stazionario lungo la direzione del vento, rappresentando una condizione tendenzialmente conservativa in assenza di considerazioni geometriche.

I risultati di PHAST mostrano un andamento coerente con quello osservato in Fluent e FLACS in termini di direzione e struttura generale della nube, ma con una distribuzione più regolare e non influenzata da effetti locali. La nube risulta più estesa longitudinalmente, con un decadimento di concentrazione più graduale e valori mediamente inferiori in prossimità della sorgente.

Confrontando i valori di circa 10 m di distanza dalla sorgente – corrispondenti al sensore 26 nelle simulazioni CFD – si osserva che la concentrazione prevista da Fluent è intorno a 110000 ppm, mentre PHAST presenta una concentrazione di circa 83000 ppm. Questo comportamento evidenzia come, pur generando una nube tendenzialmente più estesa, PHAST produca una distribuzione più uniforme e una diminuzione di concentrazione più granulare, riflettendo la natura semplificativa e media del suo modello di dispersione rispetto ai codici CFD.

#### Confronto con le soglie IDHL e NORSOK

Per valutare la rilevanza dei risultati in termini di impatto sulla sicurezza, le concentrazioni ottenute sono state confrontate con i valori di soglia proposti in letteratura. Il limite IDHL è pari a circa 40.000 ppm (4% v/v), valore oltre il quale l'esposizione può risultare pericolosa per la vita o la salute anche per brevi durate. Le linee guida NORSOK Z-013 definiscono invece soglie di rischio per scenari di rilascio tossico.

La Figura 34 riporta l'andamento della frazione molare di CO<sub>2</sub> in funzione della distanza dal punto di rilascio per i tre codici di simulazione considerati. A partire da tali andamenti è stato possibile determinare le distanze di superamento delle principali soglie di esposizione.

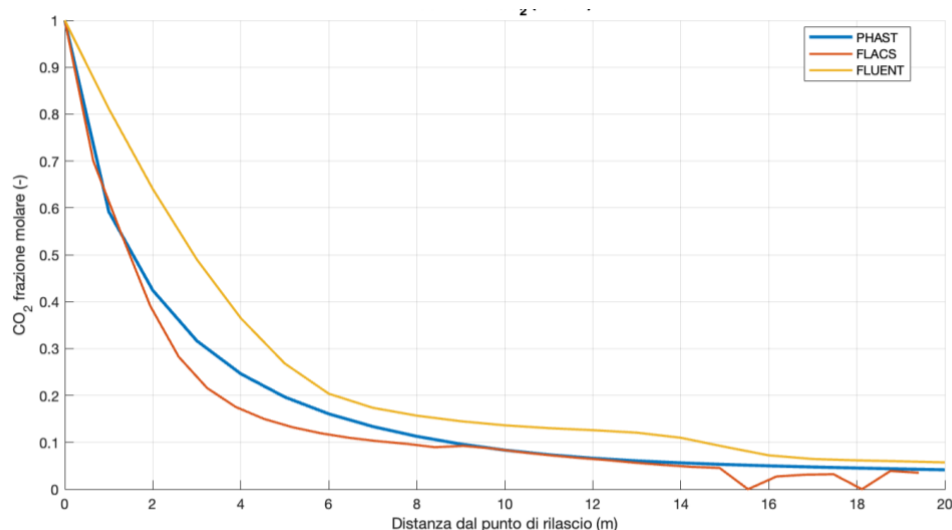


Figura 34 - Confronto distanze lungo l'asse di rilascio per il caso gassoso

La Tabella 13 riporta le distanze di superamento delle principali soglie di esposizione ottenute con i tre codici di simulazione.

Tabella 13 - Confronto soglie di tossicità per i software considerati

|                                                           | Fluent [m] | FLACS [m] | PHAST [m] |
|-----------------------------------------------------------|------------|-----------|-----------|
| IDHL (40.000 ppm)                                         | 19         | 18        | 21        |
| NORSOK esposizione di 30 min (100.000 ppm)                | 14         | 8,5       | 8,5       |
| NORSOK esposizione compresa tra 10 e 15 min (120.000 ppm) | 12         | 7         | 7,5       |
| NORSOK esposizione minore di 5 min (150.000 ppm)          | 8          | 4         | 6         |

Vi è buona coerenza tra i tre strumenti per quanto riguarda l'ordine di grandezza delle distanze di superamento delle soglie tossicologiche, ma anche differenze significative nel dettaglio locale della dispersione:

- PHAST tende a prevedere una nube leggermente più estesa, soprattutto per soglie più basse (IDHL). Ciò è coerente con la natura del suo modello monodimensionale, che non considera gli effetti di schermatura o confinamento e

quindi descrive una dispersione più libera e diffusa. Tuttavia, per le soglie più alte, PHAST mostra un decadimento rapido delle concentrazioni, segno della mancanza di accumuli locali che invece caratterizzano i modelli CFD.

- FLACS, pur coerente nel trend, mostra distanze generalmente più ridotte per le soglie più severe, segno che il modello poroso e la rappresentazione semplificata della geometria riducono la capacità del codice di catturare i picchi locali di concentrazione.
- Fluent restituisce risultati più realistici e leggermente meno estesi rispetto a FLACS per le soglie intermedie. Ciò riflette la sua capacità di riprodurre accuratamente i fenomeni di ricircolo e intrappolamento del gas sottovento agli ostacoli, che generano aree di concentrazione elevata più persistenti.

Questa divergenza evidenzia la diversa natura predittiva dei modelli: i codici CFD descrivono in dettaglio le zone di accumulo localizzato, catturando i picchi di concentrazione più pericolosi in prossimità di ostacoli o aree di ricircolo; PHAST, al contrario, fornisce una stima media e conservativa, utile per la valutazione preliminare delle distanze di sicurezza ma non adatta a rappresentare effetti di geometria complessa o flussi turbolenti.

Nel complesso, la coerenza qualitativa tra i tre strumenti conferma la capacità di PHAST di fornire risultati compatibili con i modelli CFD, pur in assenza di dettagli geometrici, e ne consolida il ruolo come strumento di screening e validazione semplificata per la pianificazione della sicurezza.

Dal punto di vista operativo, le differenze tra i tre software sono significative:

- Fluent garantisce la massima accuratezza fisica, con una risoluzione dettagliata della geometria e della turbolenza, ma richiede tempi computazionali elevati e competenze specialistiche nella generazione della mesh, nella scelta dei modelli e nella gestione numerica della simulazione.
- FLACS, pur basandosi su una mesh cartesiana semplificata e su modelli porosi, offre un buon compromesso tra dettaglio e rapidità. Tuttavia, in presenza di geometrie complesse o flussi trasversali, la rappresentazione semplificata può introdurre errori significativi.

- PHAST risulta il più leggero dal punto di vista computazionale: consente di ottenere in pochi minuti risultati stabili e ripetibili, sacrificando però il dettaglio spaziale e la rappresentazione degli effetti locali.

Il termini di usabilità, PHAST e FLACS offrono interfacce integrate e *workflow* guidati, adatti a contesti industriali e di *safety assessment*; Fluent, invece, rimane lo strumento di riferimento per l'analisi di dettaglio, validazioni sperimentali e simulazioni ad alta fedeltà in scenari complessi.

La Tabella 14 riassume l'analisi comparativa appena svolta.

*Tabella 14 - Sintesi comparativa tra FLACS, Fluent e PHAST per rilascio gassoso di CO<sub>2</sub>*

|                        | FLACS                                                                                                           | Fluent                                                                                                         | PHAST                                                                      |
|------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------|
| Tipo di modello        | CFD semi-aperto con approccio poroso                                                                            | CFD general-purpose                                                                                            | Modello integrale                                                          |
| Gestione geometria     | Geometria semplificata, rappresentazione porosa                                                                 | Geometria reale 3D dettagliata                                                                                 | Standardizzata                                                             |
| Tempo di simulazione   | 2 h                                                                                                             | 20 h                                                                                                           | < 10 min                                                                   |
| Facilità d'uso         | Alta                                                                                                            | Medio-bassa                                                                                                    | Molto alta                                                                 |
| Applicabilità          | Analisi di sicurezza e screening industriale                                                                    | Studi di ricerca e validazione fisica e analisi di sicurezza per geometrie complesse e congestionate           | QRA e analisi di screening                                                 |
| Punti di forza         | Rapidità, stabilità e robustezza                                                                                | Dettaglio, controllo totale e accuratezza                                                                      | Immediatezza                                                               |
| Limiti principali      | Geometria semplificata e minore granularità                                                                     | Tempi lunghi e complessità numerica                                                                            | Approccio medio, poco dettagliato e senza riferimento spaziale             |
| Tipologia di risultati | Distribuzione spaziale e temporale della concentrazione, individuazione di aree a rischio tossico o asfissiante | Mappe dettagliate 3D di concentrazione, densità e tempi di esposizione per valutazioni di tossicità e asfissia | Valori medi e distanze di superamento delle soglie di tossicità o asfissia |

## 5.6 Analisi dei criteri di vulnerabilità per i rilasci gassosi

L'analisi dei criteri di vulnerabilità costituisce il passaggio di collegamento tra la modellazione fisica della dispersione della CO<sub>2</sub> e la valutazione degli effetti potenzialmente letali per le persone esposte. La vulnerabilità non viene intesa come una grandezza puramente geometrica, bensì come la probabilità che un individuo subisca effetti letali a seguito dell'esposizione a una determinata concentrazione di CO<sub>2</sub> per un certo intervallo di tempo.

Il presente capitolo si concentra esclusivamente su rilasci di CO<sub>2</sub> in fase gassosa, per i quali il meccanismo di danno dominante è l'asfissia dovuta alla riduzione della concentrazione di ossigeno nell'aria.

### 5.6.1 Definizione operativa dei criteri di vulnerabilità adottati

Gli effetti della CO<sub>2</sub> sull'uomo dipendono congiuntamente dalla concentrazione inalata e dalla durata dell'esposizione, rendendo in generale inadeguato l'uso di soglie istantanee di pericolo. Tuttavia, nell'ambito del presente caso studio al fine di garantire la confrontabilità dei risultati ottenuti con i diversi codici di calcolo, si adotta una semplificazione operativa basata su un tempo di esposizione fissato pari a 10 minuti.

All'interno di questa ipotesi, l'analisi di vulnerabilità viene condotta utilizzando due criteri complementari. Da un lato, vengono adottate le soglie di letalità comunemente utilizzate in ambito normativo e modellistico, in particolare LC<sub>01</sub> e LC<sub>50</sub>. Tali soglie non vengono interpretate come limiti fisici universali, ma come indicatori ingegneristici che consentono di collegare i campi di concentrazione simulati alle conseguenze per le persone esposte, in modo coerente con le funzioni Probit implementate nei codici di calcolo e con i riferimenti normativi disponibili.

Dall'altro lato, l'analisi viene estesa all'utilizzo di criteri dose-tempo basati sul concetto della dose tossica, introducendo i livelli SLOD e SLOT. Tali criteri consentono di interpretare la vulnerabilità non solo in termini di probabilità di morte, ma anche in relazione a condizioni di danno severo.

L'approccio adottato può pertanto essere interpretata come una sezione a tempo costante di un più generale modello dose-tempo. La scelta di fissare la durata dell'esposizione consente di isolare l'effetto delle differenze di dispersione tra i modelli analizzati, evitando ulteriori complessità e permettendo un confronto coerente tra i diversi criteri di vulnerabilità.

#### Traduzione dei criteri dose-tempo in concentrazioni equivalenti

Al fine di rendere operativi i criteri dose-tempo e di consentire l'applicazione ai campi di concentrazione forniti dai modelli di dispersione, i livelli SLOT e SLOD vengono tradotti in concentrazioni equivalenti assumendo un tempo di esposizione fissato pari a 10 minuti.

Fissato il tempo di esposizione, è possibile ricavare la concentrazione equivalente associata a ciascun livello di dose tossica mediante la relazione:

$$C_{eq} = \left( \frac{DTL}{t} \right)^{1/n}$$

Nel caso seguente, i valori sono 7,9% v/v per il livello SLOT e 10,5% v/v per il livello SLOD.

Per il tempo di esposizione fissato pari a 10 minuti, le concentrazioni equivalenti associate ai livelli SLOT e SLOD risultano dello stesso ordine di grandezza delle concentrazioni comunemente associate alle soglie  $LC_{01}$  e  $LC_{50}$  utilizzate nell'analisi probabilistica. Tale convergenza non implica un'equivalenza formale tra i due criteri, che rimangono concettualmente distinti, ma rappresenta una coerenza attesa nel campo di un'esposizione di durata assegnata.

### 5.6.2 Applicazione dei criteri di vulnerabilità ai modelli di dispersione

#### Applicazione ai risultati di PHAST

Le simulazioni condotte con Phast 9.1 forniscono una valutazione sintetica della tossicità e dell'asfissia dovute alle dispersioni di  $CO_2$ . Il modello, di tipo gaussiano, restituisce in uscita le curve Probit e le curve di probabilità di morte in funzione della distanza lungo la direzione del vento, nonché il footprint tossico planare delle aree in cui vengono superate determinate soglie di vulnerabilità. Inoltre, PHAST consente la valutazione

diretta della dose tossica cumulata, rendendo possibile l'applicazione esplicita di criteri dose-tempo.

La Figura 35 mostra l'andamento della probabilità di morte in funzione della distanza dalla sorgente. La curva indica una letalità praticamente unitaria ( $P=1$ ) fino a circa 8 m dalla sorgente, con una brusca riduzione fino a  $P=0$  oltre i 13 m. La distanza di soglia  $LC_{50}$  si attesta intorno ai 10 m, in linea con le stime teoriche, ma leggermente inferiore ai limiti di riferimento di normativa evidenziando una tendenza conservativa del modello.



Figura 35 - Toxic Probability of Death vs Distance

Dal punto di vista dei criteri di vulnerabilità, PHAST fornisce una stima marcatamente conservativa: a parità di concentrazione, la probabilità di morte risulta più elevata rispetto ai limiti di riferimento normativi, con una conseguente riduzione della distanza di soglia. Tale comportamento è coerente con la natura cautelativa del modello e ne giustifica l'impiego nelle fasi preliminari di analisi della sicurezza.

In aggiunta alle curve di probabilità di morte, PHAST fornisce direttamente in uscita il valore della dose tossica cumulata in funzione della distanza della sorgente, calcola come integrazione nel tempo della concentrazione di  $CO_2$ . La Figura 36 mostra l'andamento della dose tossica in funzione della distanza sottovento per un tempo di esposizione pari a 10 minuti.

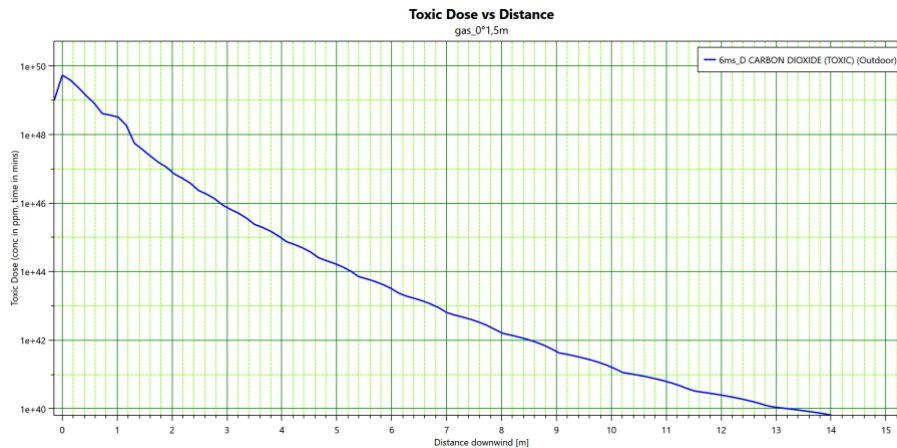


Figura 36 - Dose tossica cumulata in funzione della distanza dalla sorgente

Dal confronto con i valori di riferimento HSE è possibile identificare direttamente le soglie:

- SLOD ( $1,5 \cdot 10^{41}$ ) a una distanza di circa 10 m della sorgente;
- SLOT ( $1,5 \cdot 10^{40}$ ) a una distanza di circa 13 m.

L'area associata al superamento del limite SLOD risulta circa 7 m<sup>2</sup>, mentre l'area di danno severo associata al limite SLOT si estende fino a circa 11 m<sup>2</sup>.

La zona compresa tra le due soglie rappresenta un'area di danno severo, in cui gli individui esposti possono subire effetti gravi e perdere le capacità di evacuare autonomamente, pur non essendo soggetti a una probabilità di morte immediata elevata. Al di sotto della soglia SLOD, la dose tossica supera i livelli associati a una probabilità significativa di morte.

L'utilizzo della dose tossica consente quindi di superare l'interpretazione basata esclusivamente sulle distanze di letalità, introducendo una valutazione della vulnerabilità che tiene in conto in modo esplicito della dipendenza congiunta da concentrazione e tempo di esposizione.

#### Applicazione ai risultati di FLACS

Le simulazioni condotte con FLACS consentono di analizzare la dispersione di CO<sub>2</sub> con un livello di dettaglio spaziale superiore rispetto a PHAST, includendo in modo esplicito gli effetti della geometria, della turbolenza locale e delle condizioni di confinamento spaziale. A differenza di PHAST, FLACS non fornisce direttamente in uscita indicatori

di vulnerabilità basati su curve Probit o sulla valutazione della dose tossica cumulata, rendendo necessario un approccio di post-processing per l'analisi degli effetti sull'uomo.

L'analisi di vulnerabilità basata su FLACS si fonda pertanto sulla traduzione dei campi di concentrazione in zone di rischio, utilizzando sia criteri probabilistici, sia le soglie dose-tempo, ricavate sotto l'ipotesi di un tempo di esposizione fissato pari a 10 minuti. Le mappe di concentrazione (Figura 37) consentono pertanto di individuare aree riconducibili a condizioni di danno severo (SLOT), con una concentrazione di 79000 ppm, e di elevata probabilità di morte (SLOD), con una concentrazione di 105000 ppm.

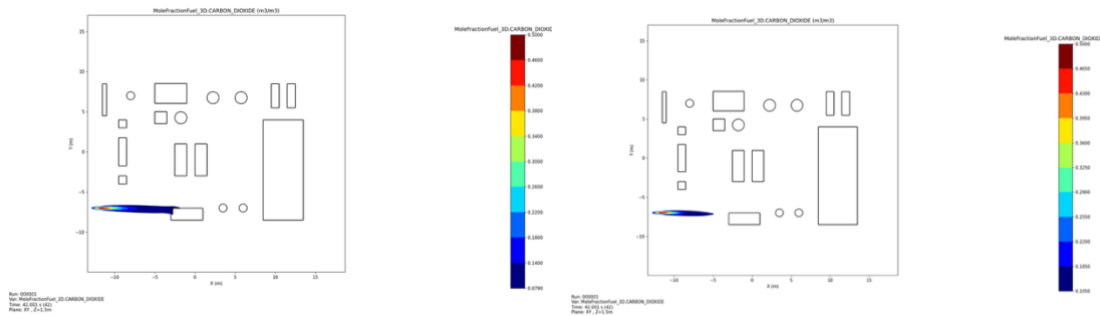


Figura 37 - Mappe di concentrazione per la configurazione con vento parallelo all'asse di rilascio per limiti SLOT (a) e limiti SLOD (b)

A differenza dell'approccio di PHAST, che restituisce zone di danno omogenee, FLACS evidenzia una distribuzione spaziale della nube di CO<sub>2</sub> dipendente dalla geometria. In prossimità della sorgente, le concentrazioni risultano generalmente più elevate rispetto a quelle stimate con modelli semplificati, a causa della maggiore sensibilità del codice agli effetti di turbolenza locale e di interpretazione fluidodinamica. Tuttavia, l'estensione laterale delle zone a elevata vulnerabilità risulta più limitata, con un rapido decadimento delle condizioni al di fuori del pennacchio principale.

Le distanze caratteristiche associate ai criteri probabilistici (LC<sub>01</sub>/LC<sub>50</sub>) risultano confrontabili, per ordine di grandezza, con quelle ottenute applicando i criteri dose-tempo (SLOT/SLOD) a partire dai campi di concentrazione. In particolare, le condizioni più gravose risultano confinate entro circa 8 m dalla sorgente, mentre le zone di danno severo di estendono fino a circa 12 m, in buon accordo con i risultati ottenuti con PHAST.

L'area associata al superamento del limite SLOD risulta circa 4 m<sup>2</sup>, mentre l'area di danno severo associata al limite SLOT si estende fino a circa 7,2 m<sup>2</sup>.

Un aspetto di particolare rilevanza emerso dall'analisi riguarda la forma delle aree di danno: mentre le distanze di soglia risultano comparabili tra i modelli, le aree caratterizzate da condizioni di tipo SLOT e SLOT differiscono in modo significativo, riflettendo la capacità di FLACS di catturare gli effetti della geometria e delle condizioni locali di dispersione. Questo elemento assume un ruolo centrale nella valutazione del rischio in contesti a elevata densità di persone, dove l'estensione spaziale delle zone di vulnerabilità può risultare più rilevante della sola distanza massima di impatto.

In sintesi, FLACS si configura come uno strumento particolarmente adatto alla valutazione spaziale della vulnerabilità, fornendo una descrizione realistica della distribuzione delle concentrazioni e consentendo l'individuazione di zone di danno severo e letale mediante l'applicazione coerente, seppur indiretta, dei criteri SLOT e SLOD.

#### Applicazione ai risultati di Ansys Fluent

Il modello Ansys Fluent, implementato mediante approccio SBAM, consente di analizzare la vulnerabilità in modo spazialmente esplicito, tenendo conto degli effetti della geometria, delle condizioni al contorno e delle interazioni locali tra flusso e ostacoli. A differenza dei modelli semplificati, la valutazione non si limita a una distanza caratteristica lungo l'asse di dispersione, ma permette di ricostruzione bidimensionale dei livelli di esposizione e dei relativi effetti sulla popolazione.

A partire dai campi di concentrazione calcolati, è stata determinata la probabilità di morte attraverso l'applicazione della funzione Probit. La Figura 38 riporta la curva di probabilità di morte lungo la direzione principale di dispersione, ottenuta interpolando i valori di ottenuti dalla funzione Probit. Si osserva un decadimento molto rapido della probabilità: in prossimità della sorgente i valori risultano prossimi all'unità, mentre oltre pochi metri la probabilità si riduce drasticamente fino a valori trascurabili. La zona caratterizzata da alta letalità (LC50) si estende per circa 11 m dal rilascio, mentre si ha una probabilità di morte definita dall'LC01 a una distanza di 13 m.

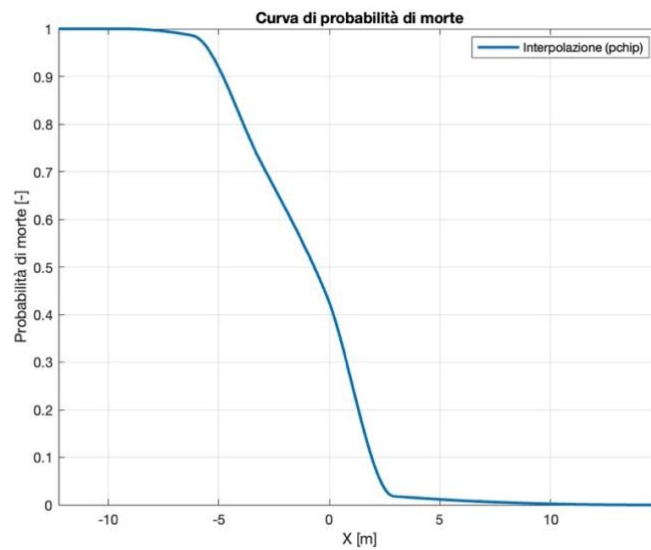


Figura 38 – Curva di probabilità di morte estrapolata da curva Probit

Parallelamente, gli stessi campi CFD sono stati interpretati in termini di criteri SLOT e SLOD (Figura 39), definendo le soglie di concentrazione equivalenti per un tempo di esposizione assegnato (10 minuti). In questo caso, l'attenzione non è posta direttamente sulla probabilità continua di morte, bensì sul superamento di limiti associati rispettivamente a danni severi (SLOT) e danni irreversibili (SLOD).

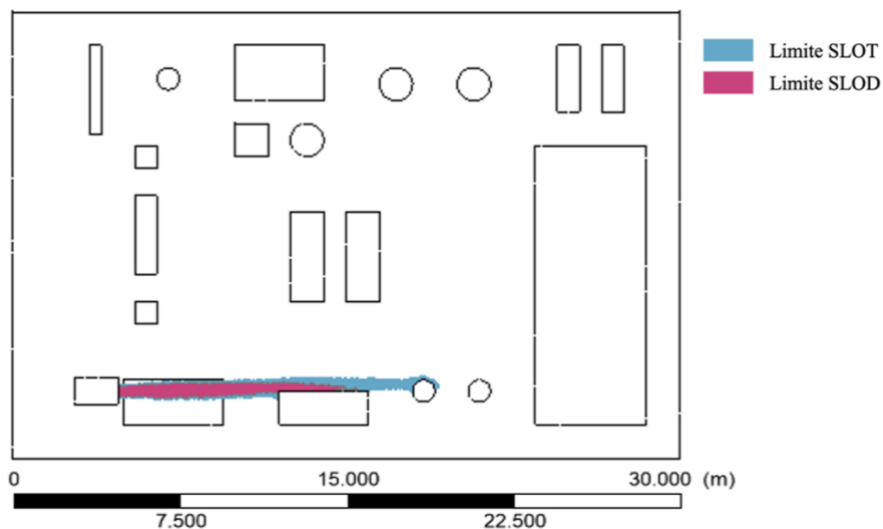


Figura 39 - Mappe di concentrazione configurazione con vento parallelo all'asse di rilascio per limiti SLOT e SLOD

Le distanze caratteristiche risultano pari a circa 12 m per il limite SLOD e 14 m per il limite SLOT, mentre le aree associate al superamento delle soglie risultano rispettivamente pari a circa 4,5 m<sup>2</sup> (SLOD) e 6,8 m<sup>2</sup> (SLOT).

Le mappe Probit e le mappe SLOD/SLOT rappresentano due modalità di lettura dello stesso campo fisico di concentrazione. La prima fornisce una descrizione probabilistica continua del danno, utile in ambito QRA; la seconda consente una delimitazione immediata di zone di rispetto, più facilmente utilizzabile in fase progettuale e regolatoria.

Nel complesso, l'utilizzo del CFD in Ansys Fluent permette di collegare in modo coerente la dinamica di dispersione alla valutazione della vulnerabilità, superando l'ipotesi di uniformità spaziale e mettendo in evidenza la reale forma delle aree di rischio, che dipende dall'interazione tra nube, geometria e condizioni ambientali.

### 5.6.3 Confronto tra i diversi software e i criteri di vulnerabilità adottati

I risultati riportati in Tabella 15 mostrano che, a fronte di distanze di soglia comparabili, le aree di danno associate ai diversi modelli presentano differenze non trascurabili.

*Tabella 15 – Sintesi delle distanze e aree di pericolo rispetto ai limiti imposti con un'esposizione di 10 minuti*

| Modello      | SLOD         |                        | SLOT         |                        |
|--------------|--------------|------------------------|--------------|------------------------|
|              | Distanza [m] | Area [m <sup>2</sup> ] | Distanza [m] | Area [m <sup>2</sup> ] |
| PHAST        | 10           | 7                      | 14           | 11                     |
| FLACS        | 8            | 4                      | 12           | 7,1                    |
| Ansys Fluent | 12           | 4,5                    | 14           | 6,8                    |

In termini quantitativi, le distanze risultano tra loro coerenti, con scostamenti inferiori al 10% per entrambi i criteri (SLOD e SLOT). Al contrario, le aree di danno evidenziano discrepanze molto più rilevanti, che si avvicinano al 40% tra PHAST e i modelli CFD, che fra di loro sono molto coerenti

In un contesto di QRA, queste discrepanze assumono un peso significativo. Il rischio è infatti funzione non della distanza massima di impatto, ma dell'estensione spaziale dell'area di vulnerabilità e della popolazione insistente su di essa. Se le distanze di soglie forniscono un'indicazione sintetica dell'intensità dell'evento, è l'area di danno che determina in modo più diretto la potenziale esposizione complessiva.

L'analisi evidenzia che i diversi software non si distinguono tanto per la stima della distanza massima d'impatto, quanto nel modo in cui la dispersione viene tradotta in area di danno. A parità di distanza, la forma e la distribuzione spaziale della nube generano nubi significativamente differenti, riflettendo le diverse ipotesi modellistiche e il diverso livello di dettaglio nella rappresentazione della turbolenza, della geometria e delle condizioni di ventilazione.

PHAST restituisce nubi regolari e tendenzialmente cautelative, coerenti con un utilizzo in fase preliminare ma meno sensibili agli effetti locali. FLACS mostra una maggiore contrazione delle aree a parità di distanza, evidenziando l'influenza della turbolenza e delle condizioni ambientali.

Ansys Fluent consente invece una valutazione diretta e puntuale delle iso-superfici di vulnerabilità, preservando l'informazione spaziale completa e permettendo un'analisi più fine delle forme e dell'estensione effettiva delle zone di danno.



## 6 ANALISI DEI RILASCI DI CO<sub>2</sub> IN FASE LIQUIDA

Il presente capitolo è dedicato all'analisi dei rilasci di CO<sub>2</sub> in fase liquida, con particolare riferimento ai fenomeni criogenici e bifase che caratterizzano questo tipo di eventi.

Rispetto ai rilasci in fase gassosa, i rilasci liquidi introducono una complessità fisica significativamente maggiore, legata alla rapida espansione del fluido, alle transizioni di fase, al raffreddamento intenso e alla possibile formazione di CO<sub>2</sub> solida. Tali fenomeni influenzano in modo sostanziale la dinamica del rilascio, la densità della nube e la sua persistenza temporale, rendendo necessaria un'analisi dettagliata dei campi di concentrazione e temperatura ottenuti dalle simulazioni CFD.

L'obiettivo del capitolo è quindi descrivere i risultati della modellazione della dinamica del rilascio criogenico e le caratteristiche della nube che si sviluppa a seguito dell'evento e successivamente confrontare i risultati ottenuti con i diversi strumenti di simulazione, evidenziandone capacità e limiti nella rappresentazione dei fenomeni fisici rilevanti. Particolare attenzione è infine rivolta all'analisi dei criteri di vulnerabilità, sia in termini di effetti sull'uomo sia per quanto riguarda gli effetti criogenici sulle strutture, al fine di valutare la coerenza delle metodologie di QRA e FECRA rispetto a scenari complessi e fortemente transitori.

### 6.1 Analisi dei risultati – PHAST

Poiché PHAST è un modello integrale monodimensionale, che non consente l'inserimento delle geometrie reali della piattaforma, è lecito attendersi una rappresentazione semplificata del fenomeno dispersivo, caratterizzata da andamenti regolari, progressivi e sostanzialmente monotoni.

La mappa di concentrazione vista dall'alto (Figura 40) mostra un'area di impatto significativamente più estesa rispetto allo scenario in fase gassosa, con distanze sottovento molto elevate.

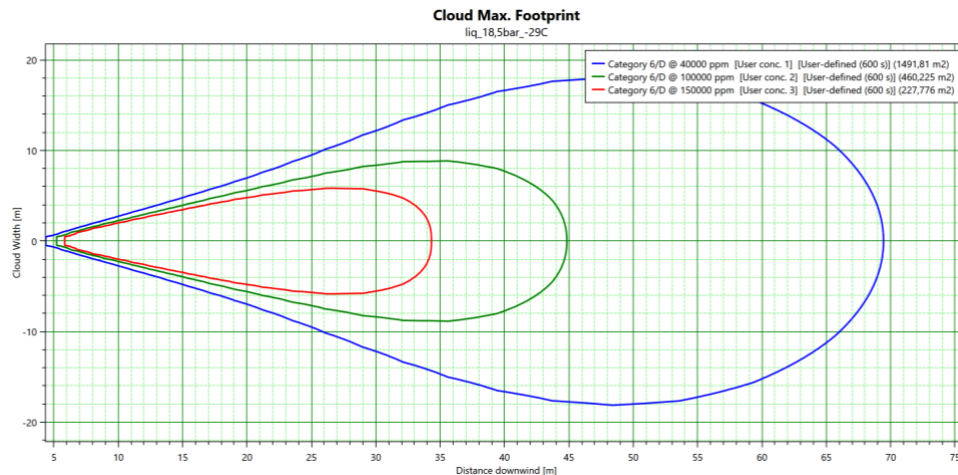


Figura 40 - Cloud Max Footprint, caso liquido (PHAST)

Tuttavia, la sola estensione non è sufficiente per valutare la capacità del modello di rappresentare correttamente un rilascio bifase così complesso. Per questo motivo è stata analizzata anche la vista laterale (Figura 41) che evidenzia una stratificazione verticale e marcata e quindi un comportamento compatibile con una dispersione dominata dagli effetti gravitazionali: la nube collassa rapidamente verso il suolo e resta confinata nelle quote basse.

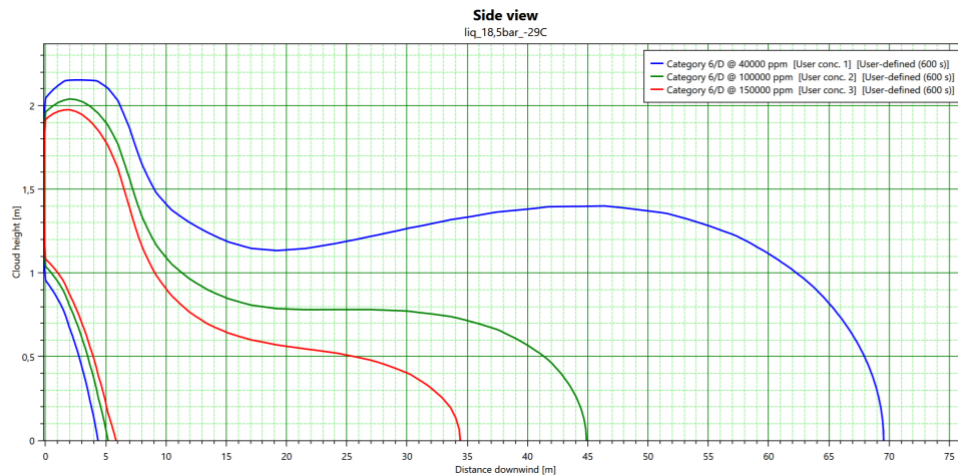


Figura 41 - Vista laterale delle concentrazioni a soglie date, caso liquido (PHAST)

In particolare, si osserva che ad un'altezza rappresentativa per la vulnerabilità umana (1,5 m) la presenza della nube risulta fortemente ridotta, fino a diventare trascurabile oltre pochi metri dalla sorgente, mentre le concentrazioni permangono significative in prossimità del suolo. Questo quadro è coerente con la natura della CO<sub>2</sub> in fase densa e con la possibile presenza di componente solida, che aumenta la densità del getto bifase.

Infine, considerando la concentrazione massima in funzione della distanza a quota fissata di 0 m (Figura 42), l'andamento mostra un decadimento progressivo lungo la direzione del vento. La forma regolare della curva è coerente con impostazione integrale del modello, che tende a restituire un'evoluzione monotona e graduale della diluizione.

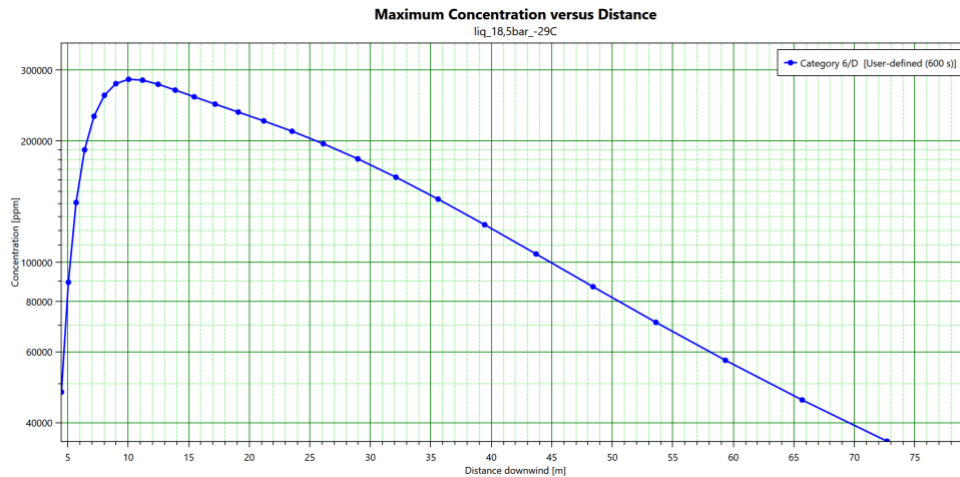


Figura 42 – Concentrazione massima in funzione della distanza a quota fissata (0 m), caso liquido (PHAST)

Per quanto riguarda l'andamento della temperatura (Figura 43), i risultati di PHAST mostrano un marcato raffreddamento nelle prime decine di metri, con valori inferiori alla temperatura di sublimazione della CO<sub>2</sub> e un successivo recupero progressivo lungo la direzione del vento. Questo comportamento è coerente con il flashing del rilascio liquido e con la possibile formazione di fase solida, che sottrae calore al sistema.

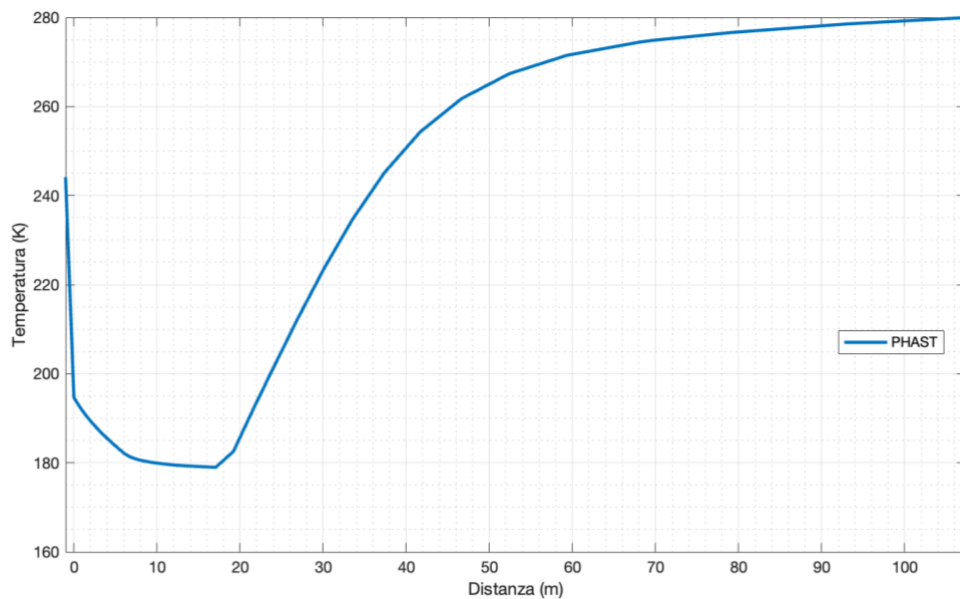


Figura 43 - Andamento della temperatura in funzione della distanza su modello PHAST

Il profilo termico rappresenta quindi un elemento fisicamente rilevante del modello, poiché mostra la corretta modellazione del fenomeno fisico.

## 6.2 Analisi dei risultati – FLACS

Le simulazioni CFD condotte con FLACS forniscono una rappresentazione tridimensionale dettagliata della dispersione della CO<sub>2</sub> all'interno della piattaforma offshore, includendo l'interazione del flusso di rilascio con le strutture. Va tuttavia ricordato che il modello non considera la formazione della fase solida, per cui la fisica del rilascio liquido è descritta in modo semplificato.

La Figura 44 riporta le mappe di concentrazione della CO<sub>2</sub> nelle tre configurazioni di vento analizzate (0°, 45° e 90°). Le distribuzioni sono rappresentative del campo di concentrazione ad un'altezza di 1,5 m e consentono di valutare l'influenza dell'orientamento del vento rispetto alla geometria sulla forma e sull'estensione della nube.

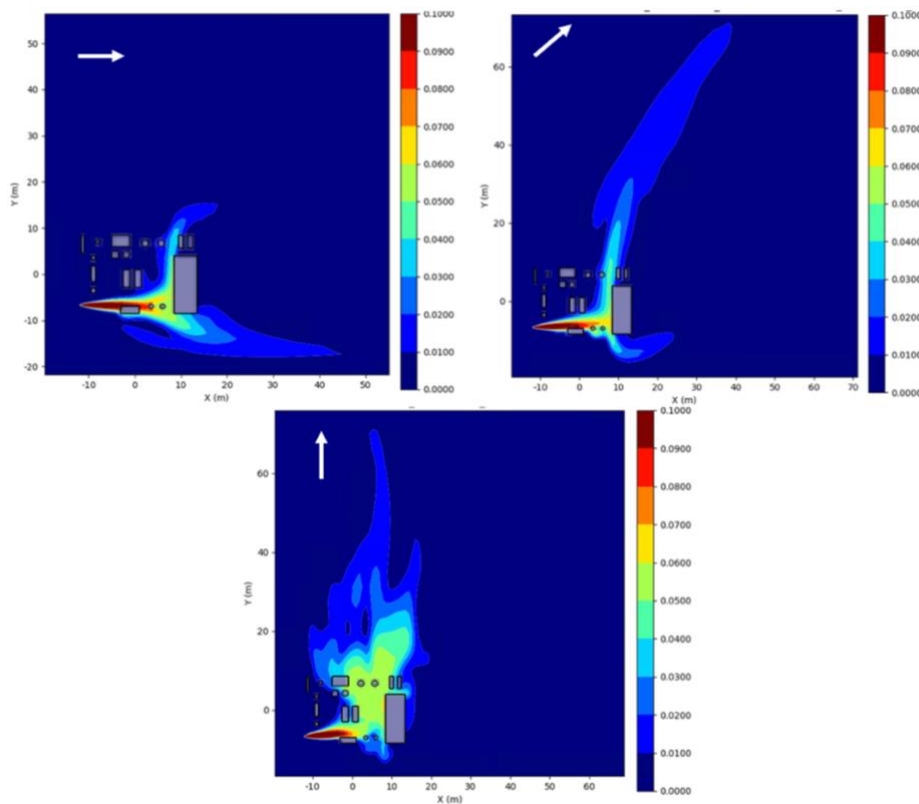


Figura 44 – Mappa di concentrazione per rilascio liquido di CO<sub>2</sub> nel modello FLACS per a) configurazione 0°; b) configurazione 45°; c) configurazione 90°

Dalle tre configurazioni emerge un punto chiaro: l'orientamento del vento cambia non solo la distanza di propagazione, ma soprattutto la distribuzione spaziale della nube. Più precisamente:

- Con vento a  $0^\circ$  la nube si sviluppa in modo prevalentemente assiale. Le distanze sottovento sono maggiori, ma l'area coinvolta resta relativamente concentrata lungo la direzione principale del rilascio;
- Con vento a  $45^\circ$  l'interazione obliqua con le strutture rompe questa simmetria: compaiono deviazioni, ricircoli e zone di accumulo locali. Le distanze massime non aumentano in modo significativo, ma l'area complessiva interessata tende ad ampliarsi e a frammentarsi;
- Nel caso di vento trasversale, la propagazione longitudinale si riduce ulteriormente, mentre cresce la distribuzione laterale attorno all'area di rilascio. La nube è meno "lunga", ma più diffusa e con ristagni in prossimità delle apparecchiature.

Il risultato più rilevante è che la configurazione più gravosa non coincide necessariamente con quella che produce la massima distanza sottovento. In un dominio tridimensionale complesso, può risultare più critica la configurazione che genera la maggiore area esposta, anche a fronte di distanze inferiori. Questo aspetto non emerge nei modelli integrali e rappresenta uno degli elementi distintivi dell'approccio CFD.

Un limite emerso dalle simulazioni è l'assenza, nel modello di FLACS, di una rappresentazione esplicita degli effetti criogenici associati al rilascio di  $\text{CO}_2$  liquida. Come mostrato in Figura 45, la temperatura della nube risulta sostanzialmente uniforme e prossima a quella imposta alla sorgente equivalente. Di conseguenza, la densità e il comportamento gravitazionale della nube dipendono unicamente dalla concentrazione del gas, senza contributi legati a raffreddamento locale o sublimazione.

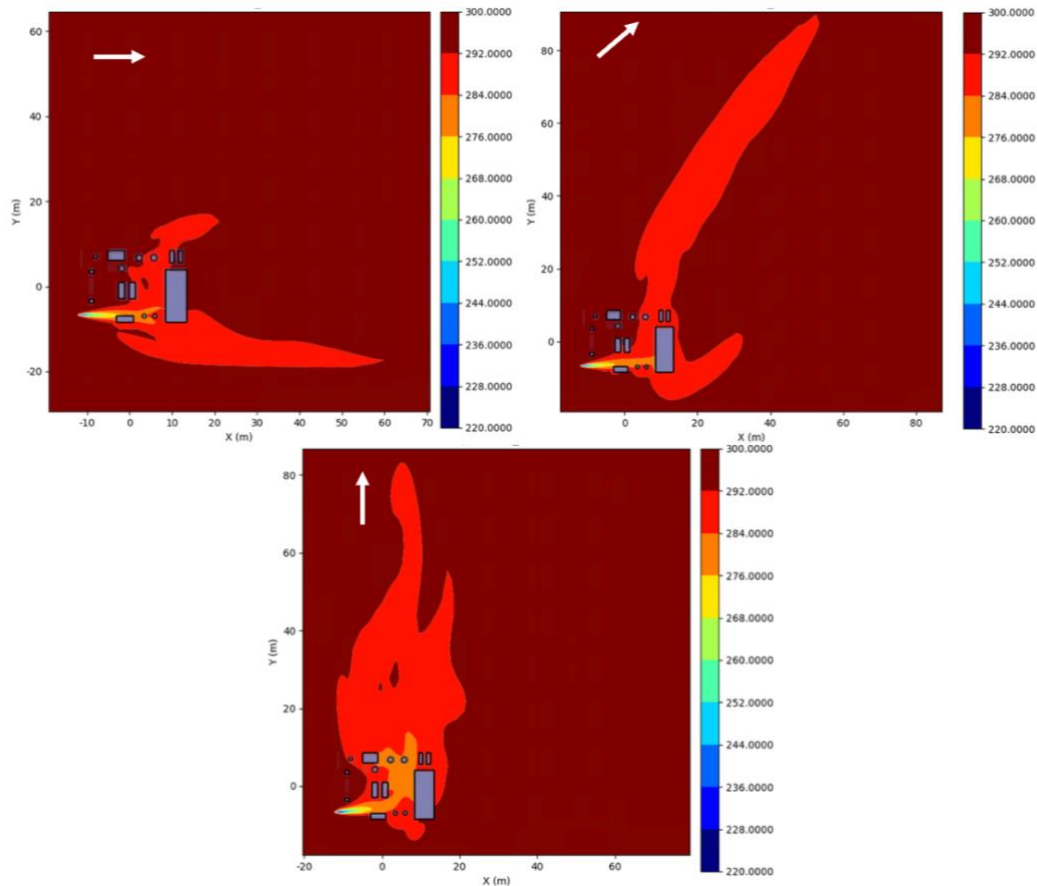


Figura 45 - Mappe di temperatura 2D per rilascio liquido da modello FLACS: a) configurazione 0°; b) configurazione 45°; c) configurazione 90°

Si può notare che le zone a bassa temperatura risultano limitate alla regione immediatamente prossima alla sorgente e non persistono lungo la propagazione della nube. Il rapido riallineamento verso condizioni prossime all'ambiente evidenzia l'assenza di un raffreddamento prolungato associato a processi di solidificazione o sublimazione.

I risultati presentati devono essere interpretati come una rappresentazione coerente della fase dispersiva successiva al rilascio. Le distanze e le aree di danno stimate risultano quindi strettamente dipendenti dalle ipotesi adottate nella fase preliminare di equivalenza del rilascio, che rappresenta uno dei principali elementi di incertezza dell'analisi.

### 6.3 Analisi dei risultati – Ansys Fluent

L'analisi condotta mediante Ansys Fluent consente di descrivere in modo dettagliato il comportamento fluidodinamico e termico del rilascio di CO<sub>2</sub> in fase liquida, superando

alcune delle semplificazioni proprie dei modelli precedentemente discussi. In questa sezione vengono presentate le configurazioni con direzione del vento allineata, a 45°C e trasversale all'asse principale del dominio.

La Figura 46 mostra le distribuzioni spaziali della concentrazione di CO<sub>2</sub> all'interno del dominio.

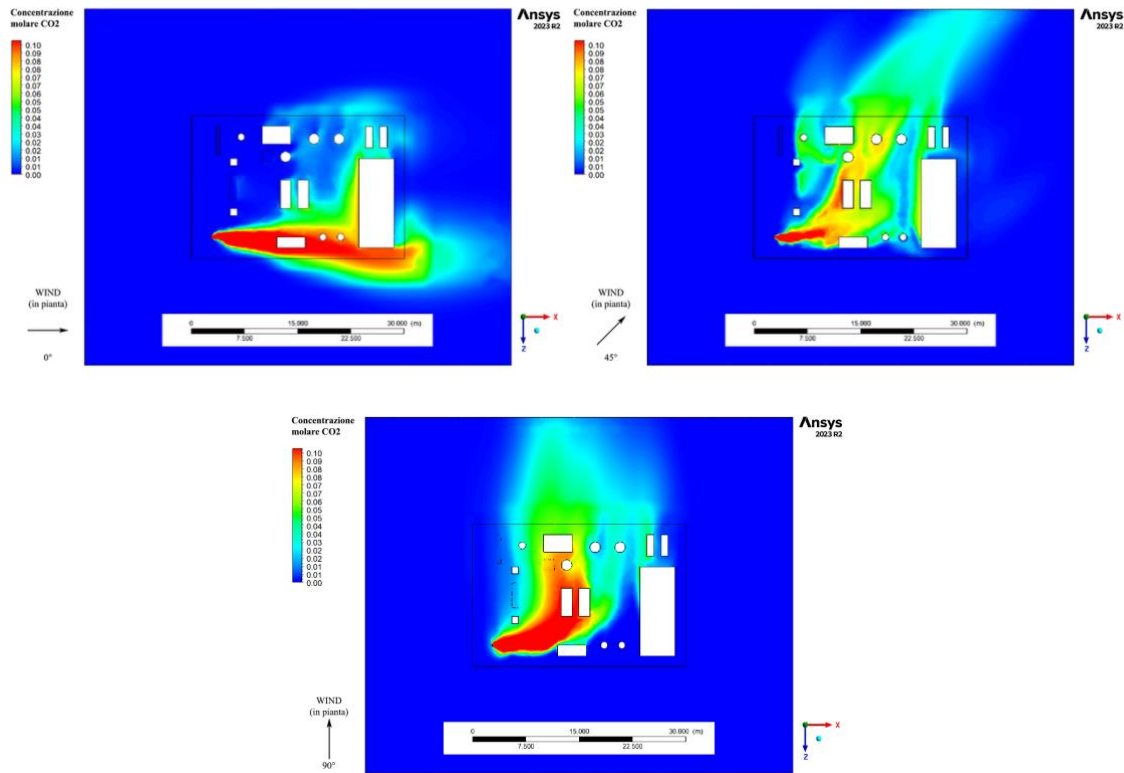


Figura 46 - Campo di concentrazione di CO<sub>2</sub> vista dall'alto: a) configurazione 0°; b) configurazione 45°, c) configurazione 90°

La vista dall'alto evidenzia una nube molto densa, con un nucleo ad alta concentrazione immediatamente a valle del punto di rilascio. La frazione molare raggiunge valori prossimi alla soglia di riferimento fino a una distanza di 30 metri dal punto di rilascio, indicando una regione dominata dalla fluidodinamica del rilascio.

La presenza degli ostacoli induce una deviazione del getto e genera zone di ricircolo che contribuiscono sia alla diluizione progressiva sia alla formazione di sacche localizzate di concentrazione più elevata. Questo comportamento risulta particolarmente evidente nella vista laterale (Figura 47), dove si osserva chiaramente la stratificazione gravitazionale della nube.

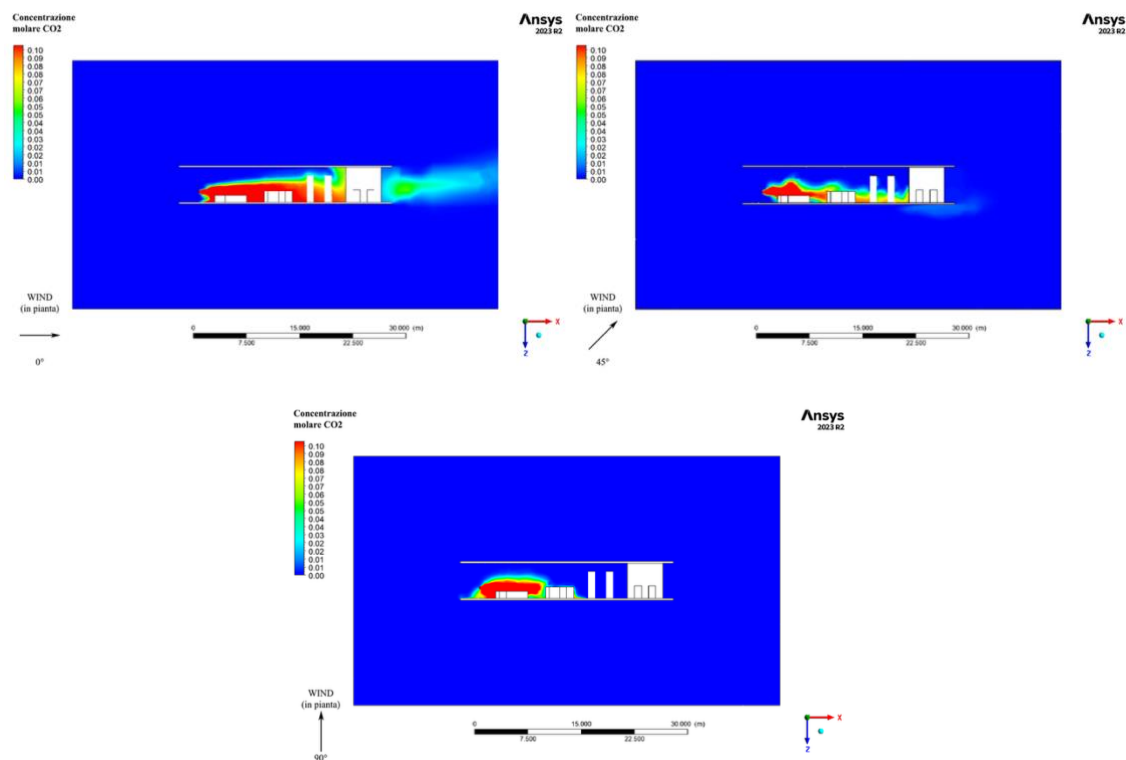


Figura 47 - Campo di concentrazione di  $CO_2$  vista laterale: a) configurazione  $0^\circ$ ; b) configurazione  $45^\circ$ ; c) configurazione  $90^\circ$

La  $CO_2$ , più densa dell'aria ambiente, rimane confinata nei primi metri del suolo, con un gradiente verticale molto marcato. La dispersione avviene quindi prevalentemente in senso orizzontale, mentre l'innalzamento verticale risulta limitato e confinato alle zone di maggiore turbolenza indotta degli ostacoli.

Dal punto di vista delle distanze di impatto, la simulazione mostra un'estensione significativa della nube in termini longitudinali, con una progressiva riduzione della concentrazione ma con persistenza di valori non trascurabili anche a distanza ai 20-30 m dal punto di rilascio. Tale comportamento conferma la natura di nube pesante del fenomeno.

L'analisi del campo di temperatura, mostrato in Figura 48, rappresenta uno degli aspetti più significativi della modellazione in Ansys Fluent.

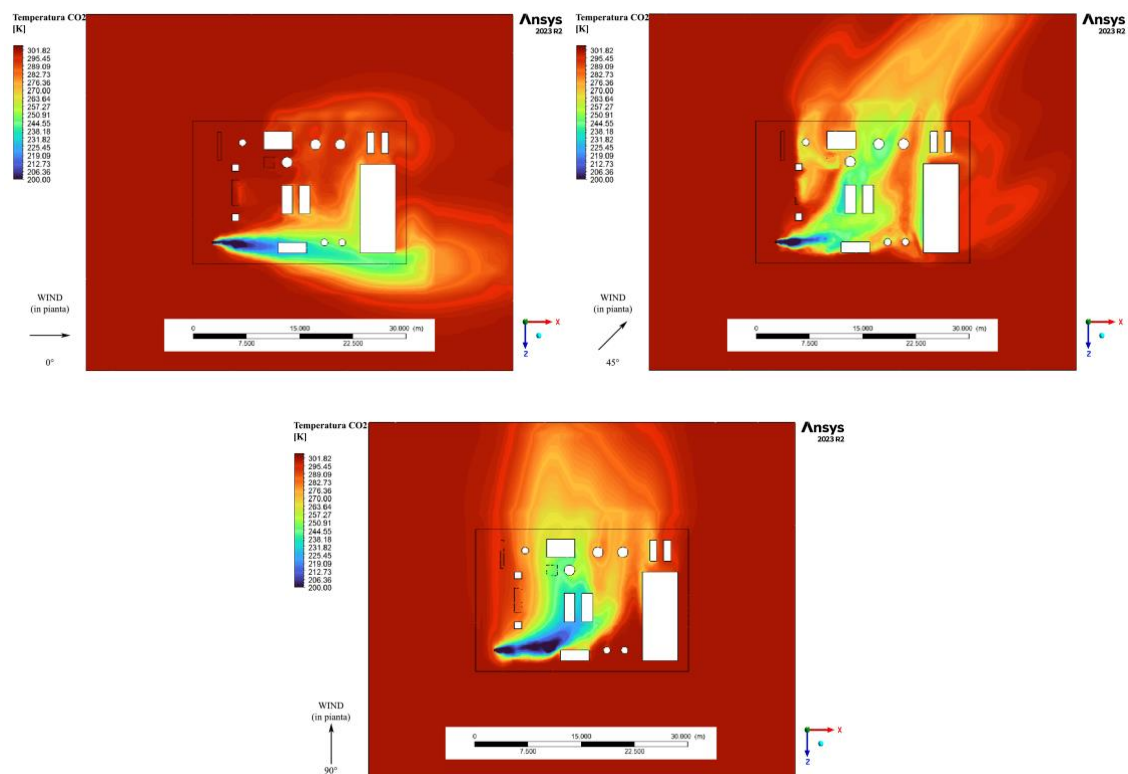


Figura 48 - Campo di temperatura di CO<sub>2</sub> vista dall'alto: a) configurazione 0°; b) configurazione 45°, c) configurazione 90°

In prossimità del punto di rilascio si osserva un marcato raffreddamento, con temperature che si discostano sensibilmente dal valore ambiente, evidenziando l'effetto criogenico associato all'espansione del fluido. Il nucleo freddo coincide spazialmente con la regione a più elevata concentrazione, confermando la stretta correlazione tra densità della nube e raffreddamento locale.

La vista laterale (Figura 49) consente di apprezzare l'evoluzione termica lungo la direzione di propagazione.

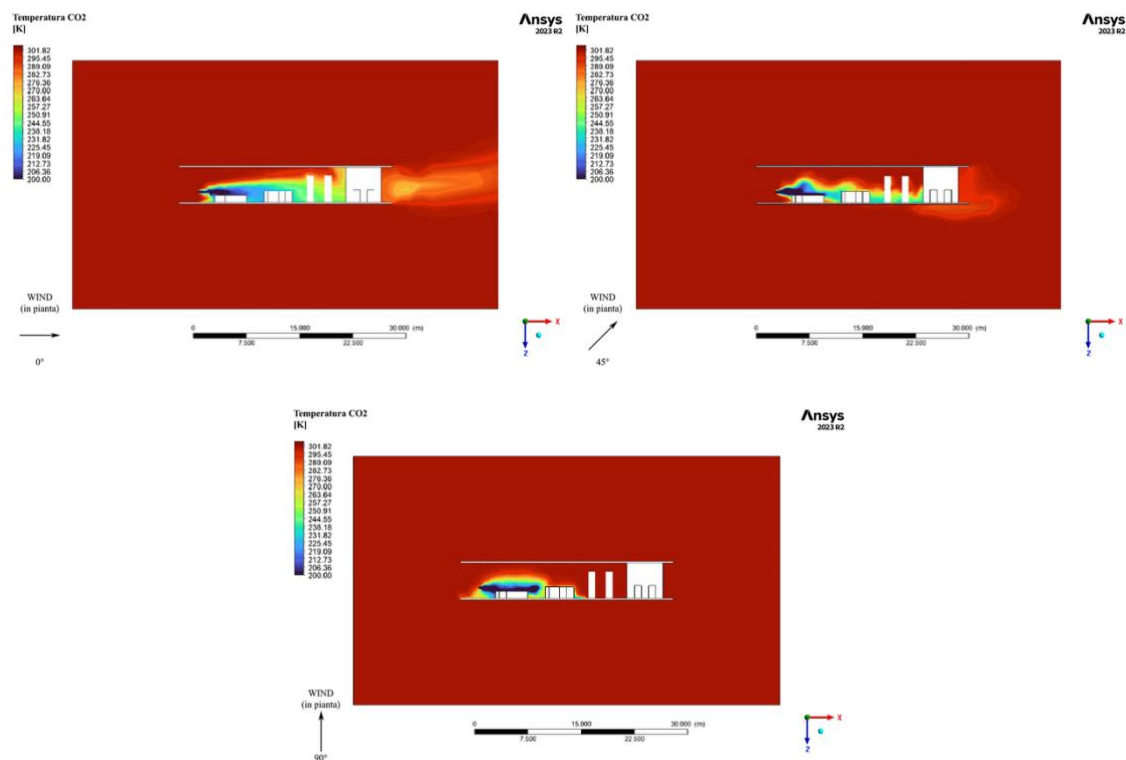


Figura 49 - Campo di temperatura di CO<sub>2</sub> vista laterale

Il gradiente di temperatura risulta particolarmente intenso nei primi metri, mentre a valle si assiste a un progressivo recupero verso condizioni prossime all'ambiente per effetto del mescolamento con l'aria circostante. Tuttavia, anche a distanze significative, permane una fascia a temperatura inferiore rispetto all'intorno, segno della persistenza dell'effetto criogenico.

Nel complesso, la modellazione mediante Ansys Fluent restituisce una rappresentazione fisicamente più completa del fenomeno, mettendo in evidenza la stretta interazione dinamica di dispersione e campo termico. La possibilità di analizzare simultaneamente concentrazione e temperatura consente di cogliere meccanismi che nei modelli semplificati risultano solo implicitamente considerati, in particolare per quanto riguarda l'effetto del raffreddamento sulla stabilità e sulla propagazione della nube.

I risultati confermano che, nel caso di rilascio liquido, la componente termica non rappresenta un elemento secondario ma parte integrante della dinamica dispersiva. La valutazione delle distanze e delle aree di impatto deve quindi essere interpretata alla luce di questo accoppiamento termo-fluidodinamico, che costituisce uno degli aspetti più importanti dell'approccio CFD adottato.

## 6.4 Confronto dei modelli di simulazione

Il confronto tra PHAST, FLACS e Ansys Fluent non riguarda esclusivamente la risposta numerica in termini di concentrazione o distanza di impatto, ma considera il modo in cui ciascun software rappresenta, o semplifica, il fenomeno bifase e la sua evoluzione termofluidodinamica.

Nel caso liquido, infatti, le differenze tra i modelli non si limitano alla filosofia di calcolo, ma impattano direttamente sulla definizione della sorgente, la gestione della transizione di fase e il trattamento del raffreddamento associato al flashing. Ne deriva che la confrontabilità dei risultati richiede un'analisi strutturata che tenga conto sia degli aspetti fisici sia delle assunzioni modellistiche adottate.

### 6.4.1 Approccio comparativo e criteri d'analisi

Per garantire una valutazione coerente, i tre modelli sono stati applicati allo stesso scenario di rilascio liquido, mantenendo invariati i parametri di processo e le condizioni ambientali. Tuttavia, a differenza del caso gassoso, la definizione della sorgente non è risultata uniforme tra i codici, poiché ciascun software adotta un differente livello di risoluzione del fenomeno bifase.

Il confronto è stato sviluppato secondo un insieme di criteri specifici per il rilascio liquido, finalizzati a valutare non solo i risultati numerici ma anche la capacità fisica dei modelli di rappresentare il fenomeno reale. La Tabella 16 sintetizza gli aspetti considerati.

*Tabella 16 - Criteri di confronto per il rilascio liquido di CO<sub>2</sub>*

| Categoria                            | Aspetti considerati                                                                        |
|--------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| Definizione della sorgente           | Modalità di modellazione del rilascio, necessità di modelli esterni, parametri equivalenti |
| Gestione del multifase               | Presenza/assenza di modellazione esplicita della fase gassosa e solida                     |
| Formazione di CO <sub>2</sub> solida | Capacità di considerare la frazione di ghiaccio secco e il suo effetto sulla dispersione   |
| Campo termico                        | Modellazione del raffreddamento criogenico e del campo di temperatura                      |

|                              |                                                                       |
|------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| Estensione della nube        | Distanze di superamento soglie (IDHL/NORSOK), area planare di impatto |
| Interazione con la geometria | Rappresentazione tridimensionale ed effetti di congestione            |

Questo schema consente di separare l'analisi fisica del fenomeno dalla semplice comparazione numerica, evitando interpretazioni riduttive basate esclusivamente sulle distanze di danno.

Inoltre, al fine di garantire un confronto coerente e riproducibile tra i risultati ottenuti con PHAST, FLACS e Ansys Fluent, sono state definite specifiche metriche quantitative applicate in modo uniforme ai tre modelli. Le grandezze selezionate sono state individuate in modo da essere fisicamente significative per la dispersione di una nube pesante criogenica, direttamente confrontabili tra strumenti con diverso livello di complessità modellistica e rilevanti ai fini dell'analisi di rischio.

Il confronto è stato quindi sviluppato attraverso le seguenti metriche:

- Distanza di propagazione a soglia di concentrazione: la distanza massima sottovento alla quale la concentrazione di CO<sub>2</sub> risulta superiore a una soglia prefissata. Questa metrica consente di valutare: l'estensione longitudinale della nube, l'effetto combinato di densità, turbolenza e diluizione ed eventuali differenze nella stabilizzazione gravitazionale tra modelli.
- Temperatura minima della nube: valore minimo di temperatura registrato lungo l'asse di propagazione o nei punti di monitoraggio selezionati. Questa grandezza è importante perché influenzata da modellazione del flashing, presenza o assenza della fase solida e trattamento dell'equazione dell'energia.
- Distribuzione termica longitudinale: andamento della temperatura lungo l'asse di rilascio. Questa metrica consente di confrontare la persistenza dell'effetto criogenico, l'efficienza del mescolamento turbolento e la rapidità di diluizione termica.
- Analisi di concentrazione e temperatura ai monitor points (tra FLACS e Fluent): per i modelli CFD, il confronto è stato ulteriormente approfondito mediante

l'analisi della concentrazione e della temperatura nei punti di monitoraggio equivalenti.

Nel post-processamento dei risultati di Ansys Fluent è stato necessario distinguere tra asse geometrico di rilascio e asse fluidodinamico del getto. La presenza di ostacoli e la ventilazione reale del dominio includono una deviazione laterale del getto, associata alla formazione di una zona di sottopressione che devia la nube e ne modifica quindi la traiettoria. Di conseguenza, le grandezze riportate in funzione della distanza sono state estratte lungo la mezzeria del flusso (Figura 50, linea gialla), così da descrivere l'evoluzione reale della nube.

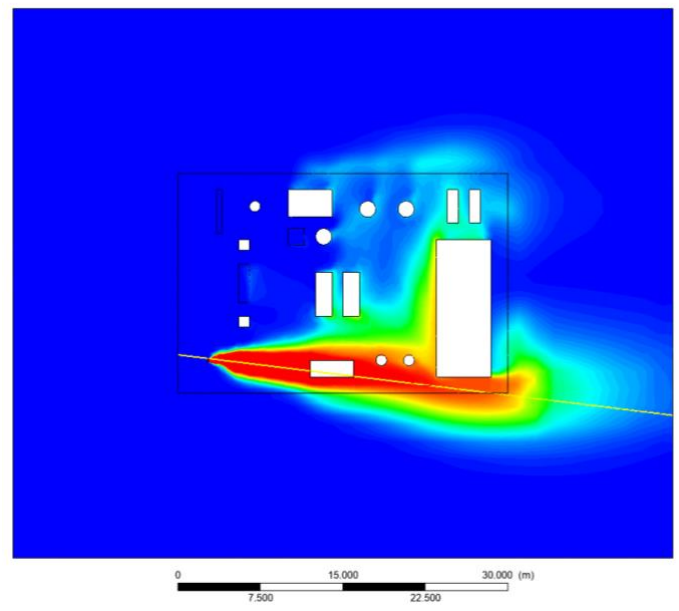


*Figura 50 - Linea di mezzeria del flusso utilizzata per il confronto quantitativo tra i modelli*

#### 6.4.2 Analisi comparativa dei modelli

L'analisi comparativa dei tre strumenti evidenzia come le eventuali discrepanze nei risultati non siano riconducibili esclusivamente a scostamenti numerici, ma derivano dalle differenti scelte modellistiche adottate nella rappresentazione del rilascio di CO<sub>2</sub> liquida.

In particolare, le principali differenze riguardano la gestione della rapida espansione a valle del foro d'uscita e della fase solida, il trattamento del campo termico e il livello di risoluzione spaziale e il grado di controllo numerico dell'utente.

Tali aspetti influenzano direttamente il raffreddamento iniziale, la densità della nube e la stabilità gravitazionale, con possibili ripercussioni sulla distanza di propagazione e sull'evoluzione termica del fenomeno.

La Tabella 17 riassume in forma sintetica le differenze operative e fisiche rilevanti ai fini del confronto sviluppato nella sezione successiva.

*Tabella 17 - Confronto operativo tra PHAST, FLACS e Ansys Fluent nel rilascio liquido di CO<sub>2</sub>*

| Aspetto                   | PHAST                            | FLACS                                | Ansys Fluent                      |
|---------------------------|----------------------------------|--------------------------------------|-----------------------------------|
| Calcolo dell'espansione   | Integrato nel codice             | Non modellato                        | Modellato in tool esterno         |
| Modellazione fase solida  | Considerata tramite correlazioni | Non modellata                        | Modellata                         |
| Comportamento termico     | Incluso nel modello integrale    | Limitato e dipendente dalla sorgente | Risolto tramite equazioni energia |
| Interazione con geometria | Assente                          | Completa 3D                          | Completa 3D                       |
| Sensibilità agli input    | Moderata                         | Elevata                              | Molto elevata (set up utente)     |
| Flessibilità fisica       | Limitata                         | Media                                | Elevata                           |
| Complessità operativa     | Bassa                            | Media                                | Alta                              |
| Costo computazionale      | Molto basso                      | Medio-alto                           | Molto alto                        |

Il confronto mostra che l'approccio più completo sotto il profilo fisico è quello adottato in Ansys Fluent, ma risulta anche il più oneroso dal punto di vista computazionale. Al contrario, il modello integrale (PHAST) garantisce rapidità e robustezza ma con limitato dettaglio spaziale, mentre il modello di FLACS fornisce una distribuzione tridimensionale che resta fisicamente molto semplificata.

La scelta dello strumento deve quindi essere coerente con l'obiettivo dell'analisi, più che con il solo livello di complessità numerica.

### 6.4.3 Confronto sulle distanze di propagazione

La distanza di propagazione è stata analizzata a partire dal profilo longitudinale della concentrazione lungo l'asse di rilascio ad un'altezza di riferimento di 1,5 m. La Figura 51 riporta l'andamento della frazione molare di CO<sub>2</sub> in funzione della distanza sottovento per i tre software utilizzati.

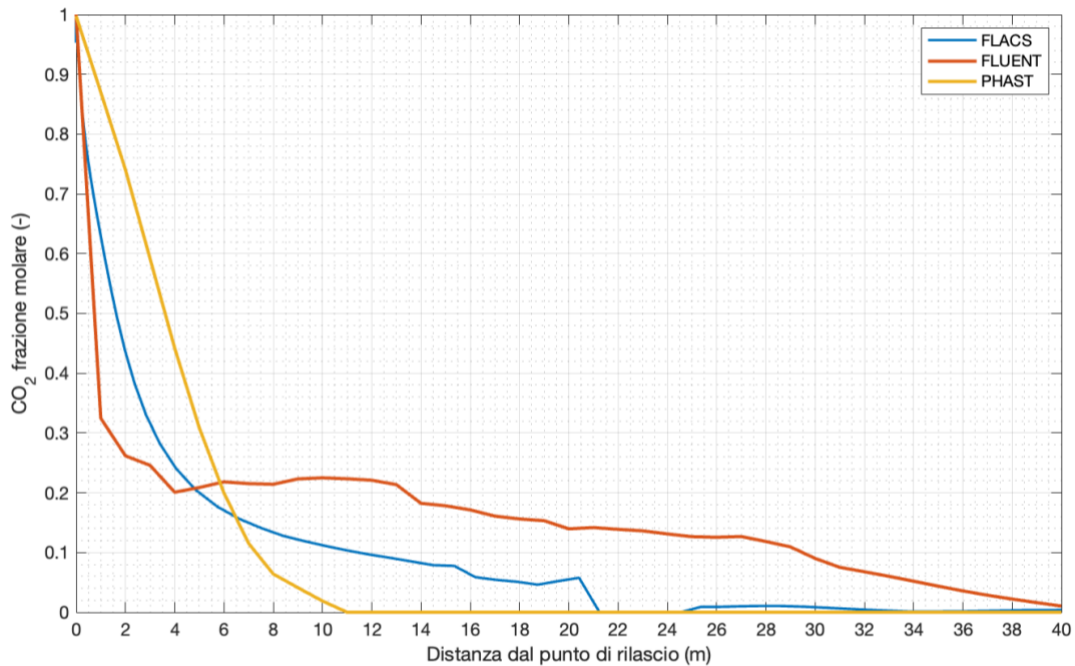


Figura 51 - Confronto concentrazione in funzione della distanza lungo l'asse di rilascio per i diversi modelli

Nel tratto iniziale (0-3 m) tutti i modelli mostrano un rapido decadimento della concentrazione a partire dal valore massimo in prossimità della sorgente, coerente con l'espansione e il mescolamento turbolento immediatamente a valle del rilascio. Tuttavia, già in questa fase emergono differenze: FLACS evidenzia la riduzione più rapida, mentre Fluent mantiene concentrazioni più elevate nei primissimi metri.

A distanze intermedie (5-15 m) i comportamenti divergono in modo più marcato. FLACS continua a diluire progressivamente fino a valori molto bassi entro circa 20 m. PHAST mostra un decadimento ancora più rapido lungo l'asse a quota 1,5 m, con un crollo quasi completo della concentrazione entro i 10 m. Questo andamento è coerente con la forte stabilizzazione gravitazionale prevista dal modello integrale, che confina la nube negli strati prossimi al suolo riducendo la presenza a quota uomo.

Fluent si discosta in modo evidente dagli altri due: dopo la fase iniziale di diluizione, il profilo si mantiene su valori significativamente più elevati e decresce in modo graduale lungo la distanza. Questo comportamento riflette la persistenza della nube lungo la traiettoria effettiva del flusso, influenzata dalla geometria e dalle strutture presenti nel dominio.

Nel complesso, il confronto mette in evidenza non solo differenze quantitative, ma approcci fisici differenti nella descrizione del fenomeno a quota 1,5 m: PHAST per effetto della stabilizzazione gravitazionale mostra una nube che si propaga ad altezza del suolo, FLACS mostra una diluizione più rapida, mentre Fluent evidenzia una maggiore persistenza della concentrazione lungo l'asse.

Le distanze massime di propagazione per le soglie di riferimento in termini assoluti e alla quota rappresentativa dell'esposizione umana (1,5 m) sono riportate rispettivamente in Tabella 18 e Tabella 19.

*Tabella 18 - Distanze massime di propagazione per le soglie di riferimento*

|                                                           | Fluent [m] | FLACS [m] | PHAST [m] |
|-----------------------------------------------------------|------------|-----------|-----------|
| IDHL (40.000 ppm)                                         | 35         | 25        | 69        |
| NORSOK esposizione di 30 min (100.000 ppm)                | 30         | 11        | 45        |
| NORSOK esposizione compresa tra 10 e 15 min (120.000 ppm) | 28         | 10        | 40        |
| NORSOK esposizione minore di 5 min (150.000 ppm)          | 19         | 7         | 34        |

*Tabella 19 - Distanze massime di propagazione ad un'altezza di riferimento di 1,5 m per le soglie di riferimento*

|                                            | Fluent [m] | FLACS [m] | PHAST [m] |
|--------------------------------------------|------------|-----------|-----------|
| IDHL (40.000 ppm)                          | 35         | 25        | 9         |
| NORSOK esposizione di 30 min (100.000 ppm) | 30         | 11        | 8         |

|                                                                 |    |    |     |
|-----------------------------------------------------------------|----|----|-----|
| NORSOK esposizione<br>compresa tra 10 e 15 min<br>(120.000 ppm) | 28 | 10 | 7,5 |
| NORSOK esposizione<br>minore di 5 min (150.000<br>ppm)          | 19 | 7  | 7   |

Dalle tabelle si può notare che, in termini assoluti, PHAST prevede distanze di propagazione significativamente superiori rispetto ai modelli CFD per tutte le soglie considerate, mentre invece ad una quota di riferimento il comportamento risulta profondamente diverso.

#### Influenza della quota di riferimento

Il confronto delle distanze massime evidenzia che il parametro “distanza di propagazione” non può essere interpretato in modo univoco senza specificare la quota di riferimento. Nel caso specifico di PHAST, come si è visto nella Figura 42:

- Al suolo ( $z = 0$  m) la nube può mantenere concentrazioni significative su distanze maggiori, coerentemente con il comportamento di nube pesante aderente al terreno;
- Alla quota di 1,5 m, rappresentativa dell’esposizione umana, la distanza di superamento della soglia si riduce drasticamente ( $\approx 9$  m), evidenziando una marcata stratificazione verticale.

Nei modelli CFD tridimensionali, la distribuzione verticale risulta invece maggiormente influenzata dall’interazione con la geometria e dal campo turbolento, con possibilità di sollevamenti locali della nube che determinano concentrazioni non trascurabili anche a quote superiori al suolo.

#### Effetto delle strutture nel dominio CFD

Un ulteriore elemento di differenziazione è rappresentato dalla presenza di strutture nel dominio CFD. In corrispondenza di circa 25 m sottovento è presente un ostacolo significativo che modifica il campo di moto, generando deviazione del flusso, incremento del mescolamento turbolento e redistribuzione della nube.

In entrambi i modelli CFD si osserva infatti una marcata riduzione della concentrazione lungo l'asse principale a valle della struttura, con un crollo dei valori oltre tale distanza. La limitazione apparente della propagazione è riconducibile quindi all'effetto dinamico dell'ostacolo che accelera la diluizione e altera la distribuzione spaziale della nube.

Nel caso di PHAST, che non risolve tridimensionalmente l'interazione con la geometria reale, tale effetto non è rappresentato in modo esplicito; il decadimento della concentrazione risulta pertanto più regolare e governato principalmente dai meccanismi integrali di diluizione e stabilizzazione gravitazionale.

#### Considerazioni conclusive

Il confronto evidenzia che le discrepanze tra i modelli nelle distanze di propagazione non sono riconducibili a semplici differenze numeriche, ma riflettono la diversa modellazione del rilascio bifase e dal raffreddamento iniziale, il differente trattamento della distribuzione verticale della nube e l'interazione (o meno) con la geometria tridimensionale del dominio.

La distanza massima risulta quindi un parametro fortemente dipendente sia dalla quota di riferimento sia dalla configurazione geometria considerata aspetto che deve essere esplicitamente dichiarato nell'interpretazione dei risultati ai fini dell'analisi di rischio.

#### 6.4.4 Confronto sui campi di temperatura

L'analisi è stata estesa al campo di temperatura, variabile determinante nel caso di rilascio di CO<sub>2</sub> liquida in quanto strettamente connessa ai fenomeni di flashing, alla formazione di fase solida e alla conseguente variazione di densità della nube.

La Figura 52 riporta l'andamento della temperatura lungo l'asse di rilascio per i tre software considerati.

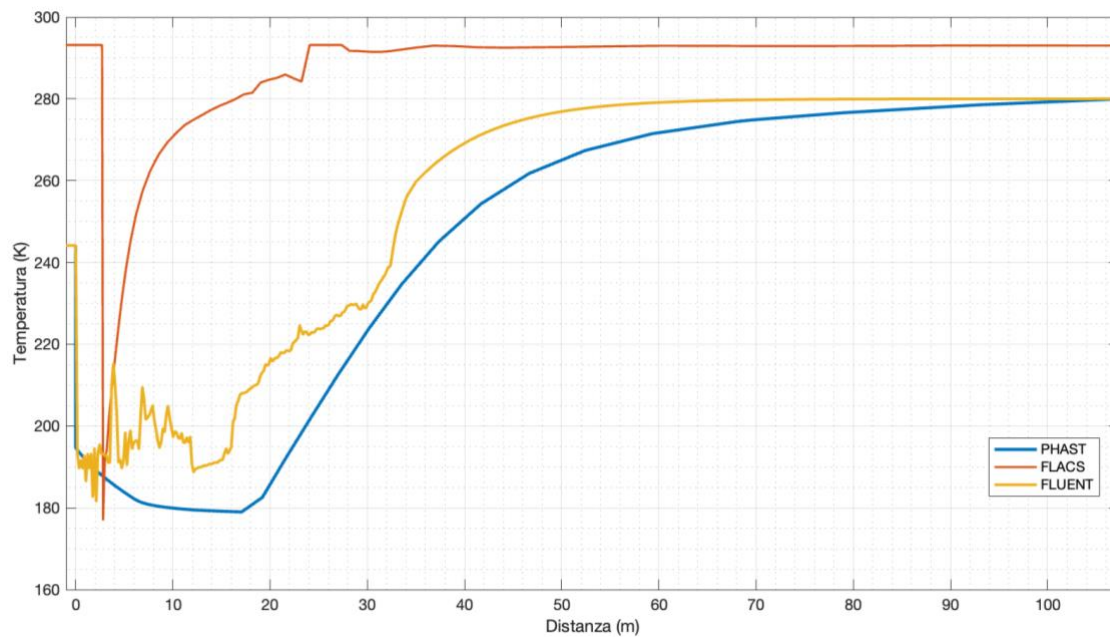


*Figura 52 - Andamento della temperatura lungo l'asse di rilascio*

Nel tratto iniziale tutti i modelli evidenziano un raffreddamento significativo in prossimità della sorgente, coerente con l'espansione rapida e i processi di depressurizzazione del rilascio.

FLACS presenta un raffreddamento iniziale netto e un recupero molto rapido verso la temperatura ambiente. Dopo i primi metri, il profilo tende a stabilizzarsi su valori prossimi alla temperatura ambiente, evidenziando una minore persistenza dell'effetto criogenico lungo l'asse di propagazione.

Il profilo di PHAST si distingue per un raffreddamento maggiore rispetto a FLACS. Pur non mostrando oscillazioni locali, il modello mantiene temperature inferiori su distanze più elevate, con un recupero più graduale rispetto a FLACS e un andamento regolare, coerentemente con la natura mediata del modello integrale.

Ansys Fluent mostra il minimo termico più pronunciato nei primi metri, con temperature che si assestano sui valori più bassi tra i modelli considerati. Il successivo recupero risulta graduale e distribuito su un intervallo spaziale più limitato, con andamento non perfettamente monotono.

È interessante notare come il profilo termico ottenuto con Ansys Fluent mostri una maggiore variabilità spaziale rispetto a PHAST e FLACS. L'andamento non

perfettamente monotono, con oscillazioni locali nel gradiente termico, è riconducibile alla natura tridimensionale della simulazione CFD.

Tale comportamento può essere associato a:

- La risoluzione spaziale della mesh, che consente di catturare gradienti termici elevati nelle regioni prossime alla sorgente e in prossimità delle strutture;
- Il modello di turbolenza adottato che influenza il livello di diffusione turbolenta e il mescolamento tra nube fredda e aria ambiente;

Le variazioni locali osservate non devono quindi essere interpretate come instabilità numeriche, ma come conseguenza della risoluzione esplicita delle interazioni tra turbolenza, geometria e campo termico. Al contrario, la maggiore regolarità del profilo PHAST è coerente con la natura integrale del modello, che restituisce una rappresentazione mediata del fenomeno e non risolve esplicitamente le fluttuazioni locali del campo di moto.

#### Persistenza del raffreddamento e ruolo della fase solida

L'elemento più significativo emerso dal confronto riguarda la diversa persistenza del raffreddamento lungo l'asse di propagazione.

Nel caso di PHAST, la presenza della fase solida nel modello termodinamico integrato contribuisce a mantenere temperature inferiori su distanze maggiori. La sublimazione della frazione solida assorbe calore dall'ambiente circostante, prolungando l'effetto criogenico e rallentando il recupero verso la temperatura ambiente. Questo comportamento si traduce in temperature minime più persistenti lungo l'asse di rilascio, recupero termico più graduale e mantenimento di una densità elevata della miscela per un tratto più esteso.

In FLACS, dove la fase solida non è modellata esplicitamente, il rilascio è rappresentato mediante sorgente equivalente gassosa, il raffreddamento iniziale risulta meno persistente e il recupero termico più rapido. L'assenza del contributo energetico associato alla sublimazione riduce la durata dell'effetto criogenico.

Ansys Fluent, risolvendo esplicitamente l'equazione di energia e il campo tridimensionale, mostra un comportamento influenzato da raffreddamento iniziale,

iniezione di particelle solide e interazione con la geometria. Le variazioni locali osservate nel profilo sono coerenti con l'accoppiamento tra temperatura, densità e turbolenza.

#### Collegamento tra temperatura e propagazione

Le differenze nel campo termico influenzano direttamente la densità della nube e, conseguentemente il comportamento dispersivo osservato nella sezione precedente. La maggiore persistenza del raffreddamento nel caso di PHAST contribuisce alla stabilizzazione gravitazionale della nube e alla concentrazione della massa nei primi strati prossimi al suolo, spiegando la marcata stratificazione verticale e la significativa riduzione della distanza di propagazione alla quota di 1,5 m.

In Ansys Fluent il recupero termico più rapido e l'interazione con le strutture favoriscono invece una maggiore redistribuzione verticale della nube, con impatti diretti sulle distanze di superamento delle soglie a quote superiori.

#### Considerazioni conclusive

Il confronto dei campi di temperatura evidenzia come la rappresentazione del raffreddamento iniziale e della fase solida sia determinante nella previsione del comportamento di una nube pesante criogenica.

Le differenze osservate tra i diversi modelli non sono riconducibili a soli effetti numerici, ma riflettono il diverso trattamento della termodinamica del rilascio, dell'equazione di energia e dell'interazione tridimensionale con la geometria del dominio.

### 6.4.5 Analisi ai monitor points

Al fine di approfondire il confronto tra i modelli CFD, è stata condotta un'analisi puntuale mediante monitor points distribuiti lungo l'asse di propagazione e in prossimità delle strutture presenti nel dominio. Per ciascun punto sono stati estratti il valore massimo di concentrazione e il valore minimo di temperatura, così da valutare l'intensità locale dell'esposizione e la persistenza dell'effetto criogenico nei due modelli CFD.

### Concentrazione massima ai monitor points

Il confronto tra i valori massimi di concentrazione, come si vede in Figura 53, evidenzia un comportamento complessivamente coerente tra i modelli lungo la maggior parte dei monitor points. Entrambi riproducono il progressivo incremento della concentrazione in prossimità della struttura e il successivo decadimento oltre la zona di interazione principale.

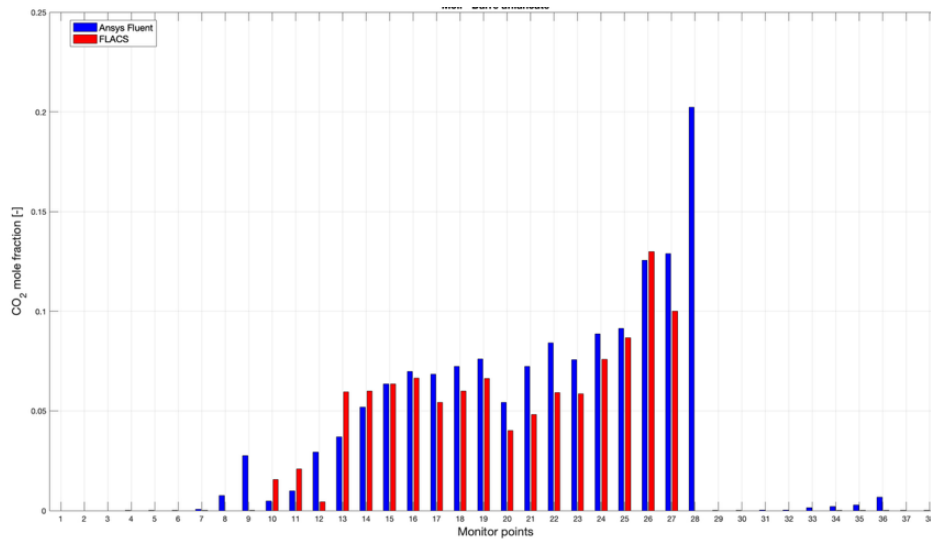


Figura 53 - Confronto concentrazione massima ai monitor points in Ansys Fluent e FLACS

Le differenze più significative emergono nei punti più vicini alla zona di rilascio e in corrispondenza dell'accumulo localizzato, in particolare monitor point 28, dove Fluent restituisce un valore sensibilmente superiore rispetto a FLACS. In tale punto la concentrazione prevista da Fluent risulta decisamente più elevata, evidenziando un maggiore confinamento locale della nube.

Questa discrepanza può essere ricondotta a diversi fattori modellistici. In primo luogo, FLACS utilizza una sorgente equivalente gassosa che non riproduce esplicitamente la formazione e la successiva sublimazione della fase solida. L'assenza della componente solida, caratterizzata da elevata densità e tendenza alla sedimentazione immediata, comporta una minore concentrazione locale nei punti immediatamente prossimi al rilascio.

Inoltre, la diversa risoluzione spaziale e il trattamento della turbolenza possono influenzare la capacità del modello di catturare accumuli localizzati in prossimità delle strutture. Fluent, grazie alla risoluzione più dettagliata del campo tridimensionale e

all'accoppiamento esplicito tra densità e campo di moto, tende a evidenziare maggiormente fenomeni di confinamento e ristagno locale.

Le differenze osservate non indicano una incoerenza globale della distribuzione della nube, ma piuttosto una diversa sensibilità dei modelli ai fenomeni locali nelle regioni caratterizzate da forti gradienti di concentrazione.

#### Temperatura minima ai monitor points

L'analisi dei valori minimi di temperatura, come si vede in Figura 54, mostra un comportamento particolarmente interessante se confrontato con quanto osservato lungo l'asse di rilascio.

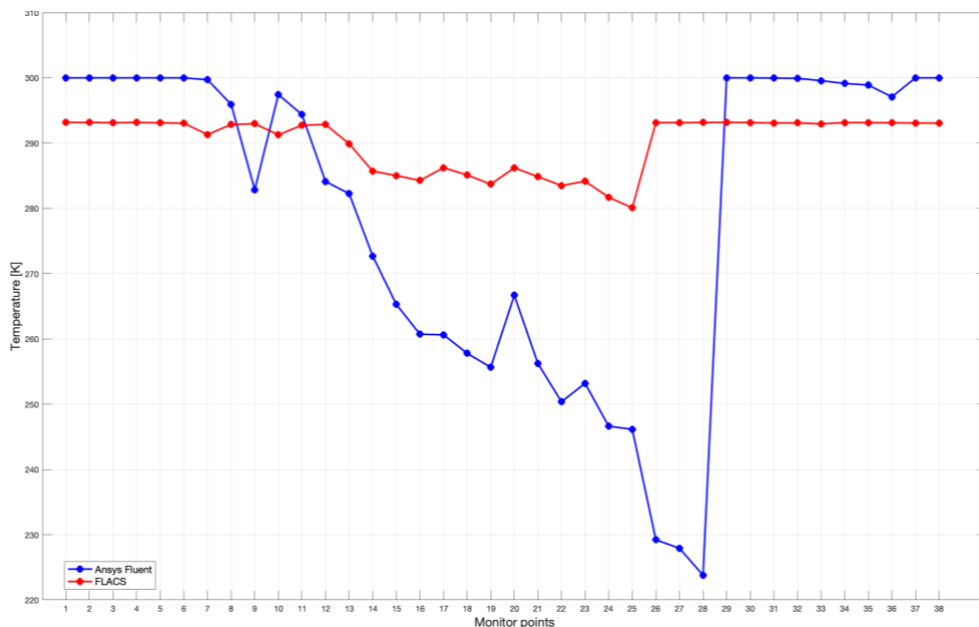


*Figura 54 - Confronto temperatura minima ai monitor points in Ansys Fluent e FLACS*

Nel profilo longitudinale era emersa la presenza di temperature molto basse in prossimità del getto. Tuttavia, l'analisi dei monitor points evidenzia che, una volta allontanatisi leggermente dall'asse diretto del rilascio, le differenze tra i modelli diventano più marcate.

Ansys Fluent mostra un raffreddamento significativamente più pronunciato nei monitor point prossimi alla zona di accumulo (in particolare tra 24 e 28), raggiungendo temperature sensibilmente inferiori rispetto a FLACS. Questo comportamento è coerente

con la maggiore concentrazione locale osservata negli stessi punti, a conferma del forte accoppiamento tra concentrazione, densità e campo termico.

In FLACS, al contrario, il raffreddamento risulta più contenuto e meno persistente nei punti laterali o immediatamente a valle della struttura. Tale comportamento può essere ricondotto sia all'assenza della modellazione esplicita della fase solida, sia alla rappresentazione del rilascio mediante sorgente equivalente gassosa, che tende a ridurre l'intensità e la durata dell'effetto criogenico al di fuori dell'asse principale del getto.

L'analisi evidenzia quindi che, mentre lungo l'asse di rilascio le differenze termiche possono apparire più contenute, nelle regioni leggermente decentrate rispetto al getto emergono con maggiore evidenza le differenti capacità dei modelli di rappresentare l'accumulo locale, la stratificazione e la persistenza del raffreddamento.

#### 6.4.6 Sintesi del confronto

Il confronto sviluppato evidenzia che i tre modelli presentano caratteristiche e ambiti di maggiore efficacia differenti nel caso di rilasci di CO<sub>2</sub> liquida.

PHAST si distingue per la rapidità di applicazione e per l'integrazione diretta della termodinamica del rilascio bifase, inclusa la formazione della fase solida. Tale impostazione consente una rappresentazione coerente del raffreddamento criogenico e della stabilizzazione gravitazionale al suolo, risultando tendenzialmente conservativa nelle stime di estensione della nube a quota 0 m. Tuttavia, l'assenza di una risoluzione tridimensionale della geometria limita la capacità di rappresentare fenomeni locali di accumulo e redistribuzione verticale.

Ansys Fluent offre il livello di dettaglio fisico più elevato, grazie alla risoluzione esplicita dell'equazione dell'energia, dell'accoppiamento densità-campo di moto e dell'interazione tridimensionale con le strutture. ciò consente una descrizione più fedele dei fenomeni locali di confinamento, ristagno e stratificazione, in particolare in prossimità degli ostacoli. Tale approccio richiede tuttavia una maggiore accuratezza nella definizione della sorgente e nella scelta dei parametri numerici, risultando più sensibile alle impostazioni di simulazioni.

FLACS consente una modellazione tridimensionale efficace della dispersione in ambienti congestionati, ma nel caso specifico del rilascio criogenico di CO<sub>2</sub> liquido la rappresentazione mediante sorgente equivalente gassosa e l'assenza di modellazione esplicita della fase solida possono ridurre la persistenza del raffreddamento e attenuare i picchi locali di concentrazione e temperatura. Il modello risulta quindi maggiormente orientato alla descrizione della dispersione geometrica piuttosto che alla ricostruzione dettagliata dei fenomeni termodinamici del rilascio bifase.

Nel complesso, il confronto evidenzia che la scelta del modello deve essere coerente con l'obiettivo dell'analisi: valutazioni preliminari e conservative possono essere efficacemente condotte con approcci integrali, mentre l'analisi di fenomeno locali in presenza di strutture richiede strumenti CFD con risoluzione tridimensionale e trattamento esplicito della fase solida.

## 6.5 Analisi dei criteri di vulnerabilità per i rilasci liquidi

L'analisi dei rilasci di CO<sub>2</sub> in fase liquida introduce una complessità significativamente maggiore rispetto ai rilasci in fase gassosa, in quanto ai meccanismi di dispersione e diluizione della nube si affiancano effetti criogenici intensi e fenomeni di transizione di fase. La valutazione della vulnerabilità non può pertanto basarsi su un singolo parametro, ma deve tenere conto di diversi meccanismi di danno, ciascuno caratterizzato da criteri specifici e potenzialmente dominanti in regioni spaziali differenti.

### 6.5.1 Vulnerabilità umana: asfissia e tossicità

La valutazione della vulnerabilità umana per esposizione a CO<sub>2</sub> è stata condotta distinguendo tra criteri a soglia e criteri dose-risposta. I primi (IDHL e intervalli NORSOK) consentono una lettura immediata delle distanze di superamento, ma restituiscono una classificazione discreta del pericolo. Per collegare i risultati di simulazione a una stima quantitativa continua del danno, sono stati adottati due approcci dose-risposta, ovvero la funzione probit proposta da RIVM/DBS e il modello toxic load dell'HSE basato sui livelli di SLOT e SLOD.

### Applicazione della funzione Probit ai risultati di simulazione

Le concentrazioni ottenuti dai tre modelli (PHAST, FLACS e Ansys Fluent) sono state trasformate in probabilità di letalità lungo la direzione di propagazione del pennacchio, ottenendo curve  $P_{\text{death}}(x)$  in funzione della distanza sottovento.

Le curve di letalità derivanti da ogni modello sono mostrate in Figura 55, Figura 56 e Figura 57.

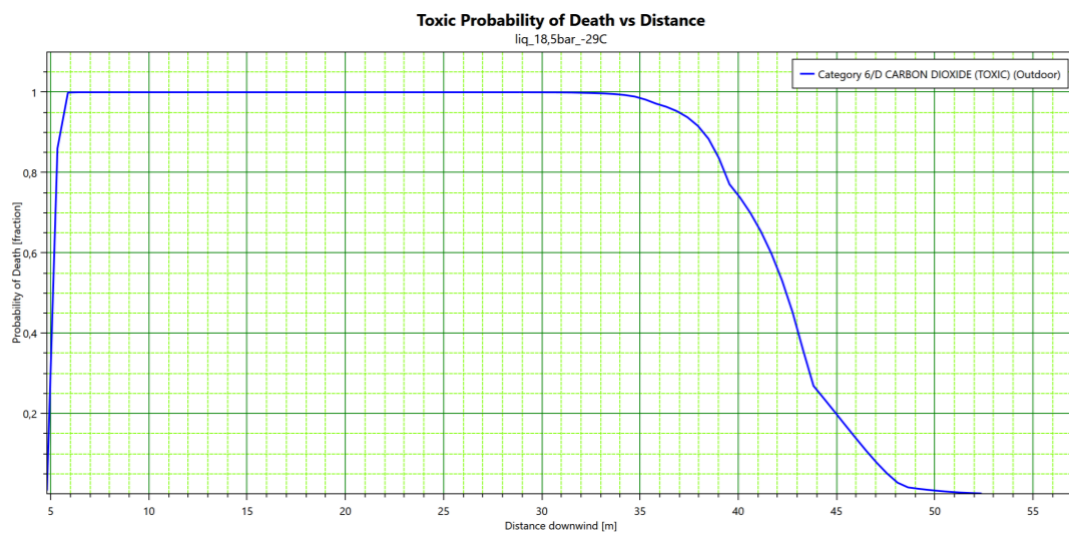


Figura 55 - Curva di letalità per rilascio liquido derivante dal modello PHAST

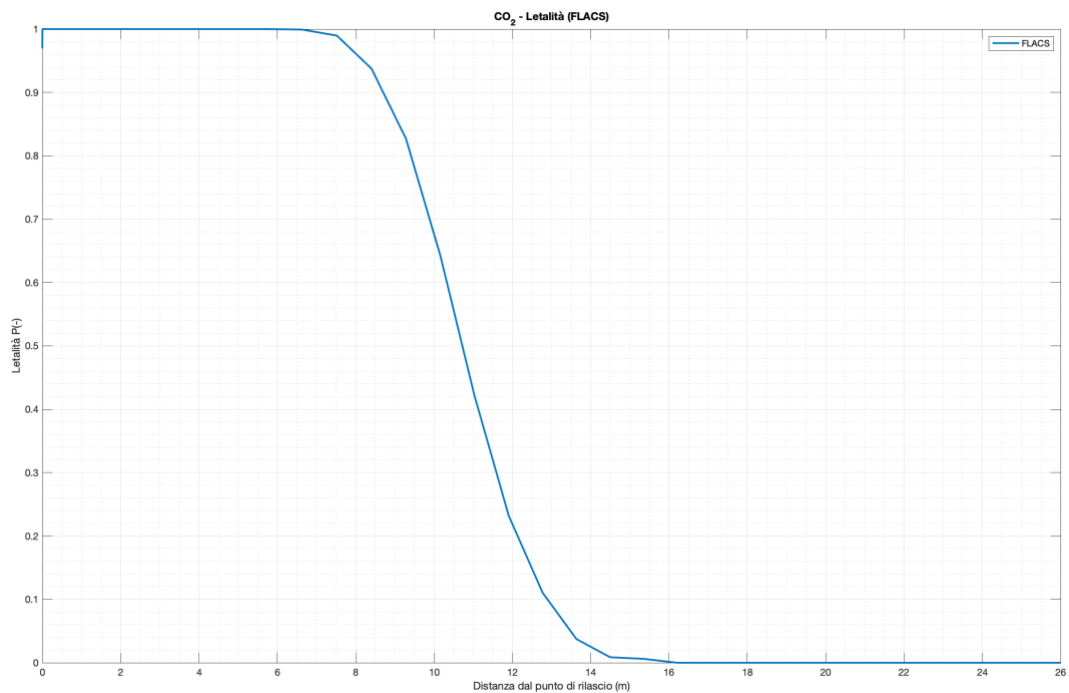


Figura 56 - Curva di letalità per rilascio liquido derivante dal modello FLACS

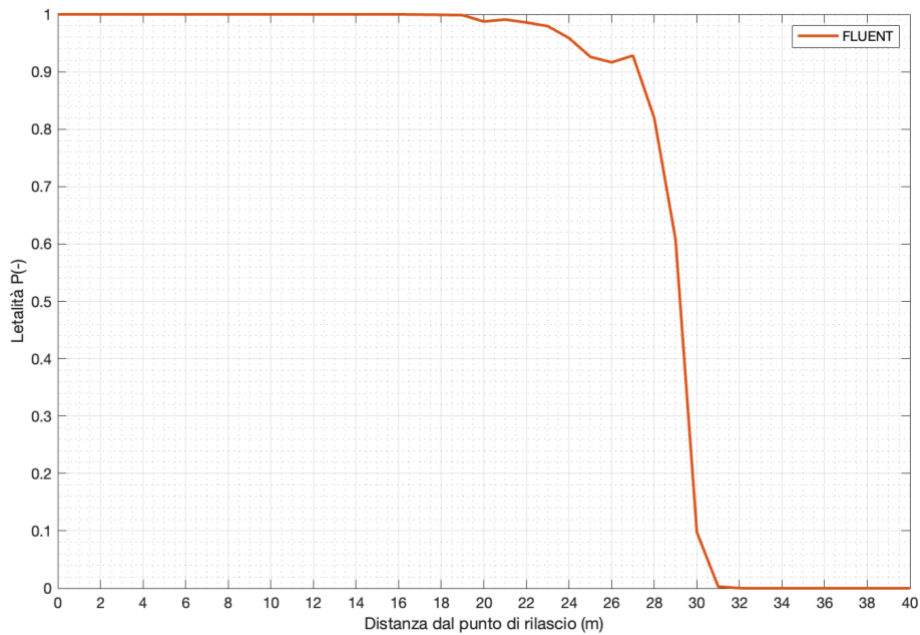


*Figura 57 - Curva di letalità per rilascio liquido derivante dal modello Ansys Fluent*

L'analisi delle curve evidenzia differenze sostanziali nella distribuzione spaziale del rischio.

PHAST presenta un'estensione molto ampia della zona a probabilità prossima all'unità, con un decadimento progressivo che si sviluppa su un intervallo spaziale esteso. Tale andamento indica una valutazione fortemente conservativa dell'area a letalità quasi certa lungo l'asse di propagazione.

FLACS, al contrario, mostra una zona a letalità elevata confinata nei primi metri del rilascio, seguita da una rapida riduzione della probabilità fino a valori trascurabili.

Ansys Fluent evidenzia un comportamento intermedio in termini di forma, ma con un'estensione della regione ad alta probabilità significativamente maggiore rispetto a FLACS e inferiore rispetto a PHAST.

Il confronto diretto (Figura 58) mette in evidenza che le differenze tra i modelli non riguardano solo l'estensione spaziale, ma la rappresentazione fisica del fenomeno.

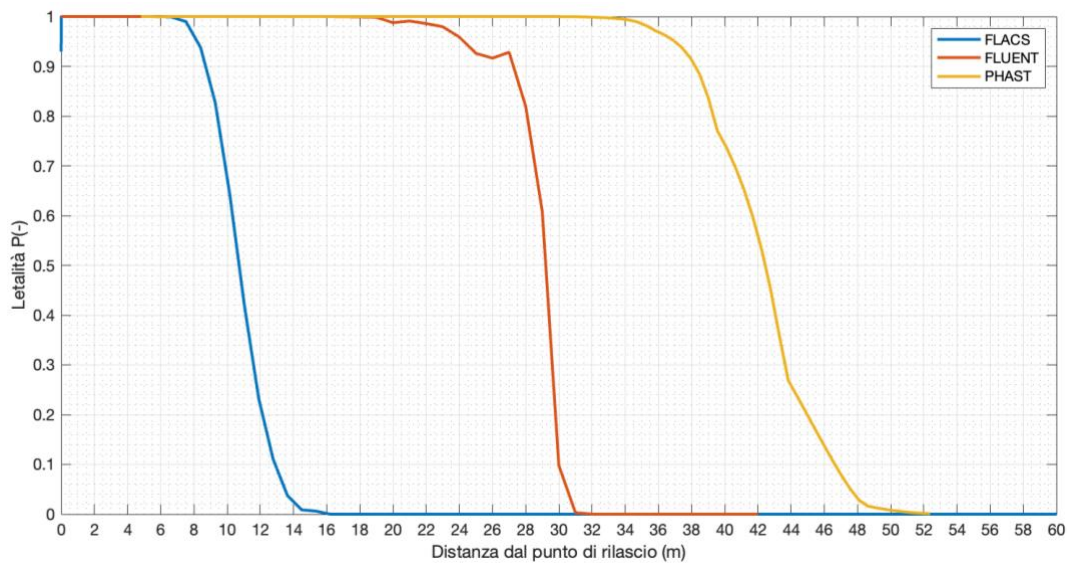


Figura 58 - Confronto letalità FLACS e Ansys Fluent

È evidente che tutte le curve presentano una diminuzione progressiva della probabilità di morte all'aumentare della distanza di rilascio. Questo comportamento è coerente con la natura dose-risposta della funzione Probit. Tuttavia, l'estensione spaziale della regione a probabilità elevata mostra differenze sostanziali che non possono essere interpretata come semplici scostamenti numerici.

Da un lato, l'approccio che utilizza una sorgente equivalente gassosa (FLACS) mostra una riduzione molto anticipata della probabilità di morte e quindi la zona a letalità severa risulta confinata nei primi metri. Questo comportamento è coerente con quanto discusso in precedenza: la mancata modellazione esplicita della fase solida e del raffreddamento associato alla sublimazione porta a una diluizione più rapida e a una sottostima delle distanze rilevanti. Questo si traduce in una valutazione meno severa del rischio.

All'estremo opposto, l'approccio integrale (PHAST) mantiene probabilità prossime all'unità su distanze molto maggiori. La persistenza della letalità lungo l'asse principale è amplificata dalla rappresentazione semplificata e dall'assenza di una risoluzione tridimensionale della geometria, che non consente di catturare deviazioni e redistribuzioni della nube. Il risultato è una stima fortemente conservativa, che estende significativamente la zona a probabilità elevata.

Ansys Fluent si colloca in una posizione fisicamente più coerente: la probabilità elevata si estende oltre quanto previsto dall'approccio semplificato, ma il decadimento non

presenta l'eccessiva persistenza osservata nel modello integrale. L'interazione con la geometria, la variazione di densità e il mescolamento turbolento modificano infatti la distribuzione spaziale della nube, restituendo una delimitazione della zona a rischio che riflette sia la severità iniziale del rilascio sia la reale evoluzione tridimensionale del pennacchio.

Le curve mostrano che la valutazione della vulnerabilità umana tramite Probit è fortemente sensibile alla qualità della modellazione fisica del rilascio. Un'eccessiva semplificazione fisica tende a ridurre la zona critica, mentre un'impostazione puramente integrale tende ad ampliarla in modo conservativo. La rappresentazione più completa della fisica del fenomeno consente invece una stima più equilibrata e robusta delle distanze associate a probabilità intermedie ed elevate di letalità.

#### Applicazione del modello toxic load – SLOT e SLOD

A differenza dell'analisi Probit, che restituisce una distribuzione continua della probabilità di letalità, l'approccio basato sulla dose tossica introduce un criterio di superamento di soglia: per ciascun punto del dominio viene valutato il carico tossico cumulato e viene confrontato con i valori di riferimento SLOT e SLOD.

Il risultato non è quindi una curva probabilistica, ma una delimitazione spaziale delle aree in cui il carico tossico supera il livello associato a bassa probabilità di morte (SLOT) o a probabilità significativa (SLOD).

In Figura 59, Figura 60 e Figura 61 sono riportati i limiti SLOD e SLOT per i diversi software. Si ricorda che mentre per FLACS e Ansys Fluent si andava a creare un'area sulla geometria, per quel che riguarda PHAST i dati sono output diretti del modello e che quindi vengono prese come riferimento le soglie di  $1,5 \cdot 10^{41}$  per la soglia SLOD e  $1,5 \cdot 10^{40}$  per la soglia SLOT.



Figura 59 - Dose tossica in funzione della distanza per modello PHAST rilascio liquido

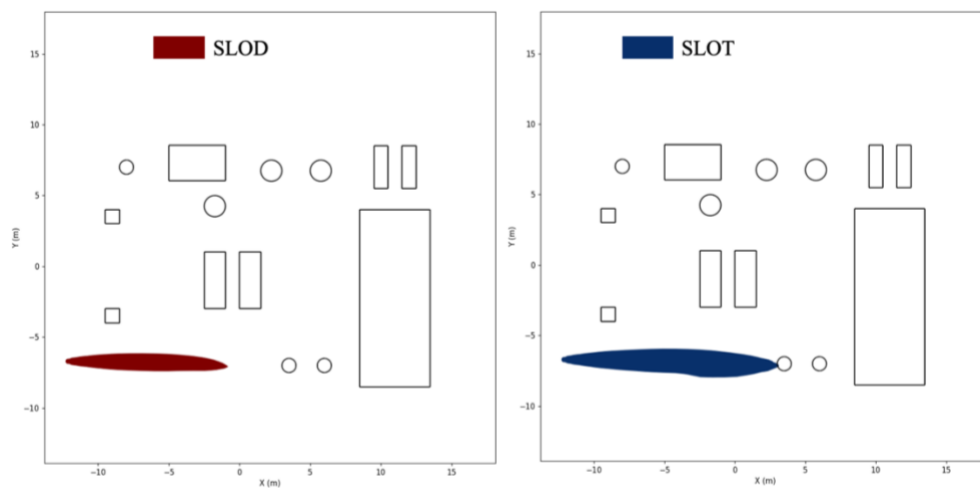


Figura 60 - Mappa dei limiti SLOD e SLOT per modello FLACS

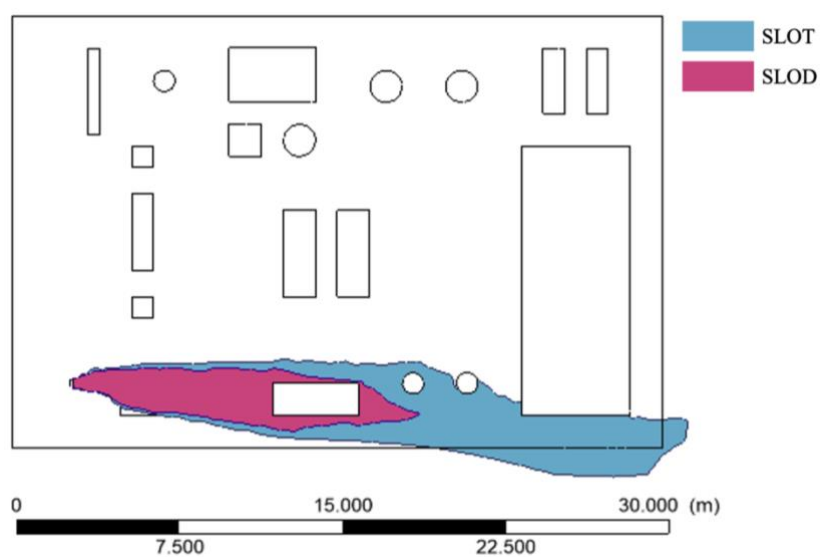


Figura 61 - Mappa dei limiti SLOD e SLOT per modello Ansys Fluent

Dalle immagini è possibile estrapolare quelle che sono le distanze e le aree di superamento dei limiti. Queste evidenziano marcate differenze tra i diversi software, come si può vedere da Tabella 20.

*Tabella 20 - Distanze e aree per i limiti SLOT e SLOD*

| Modello      | SLOD         |                        | SLOT         |                        |
|--------------|--------------|------------------------|--------------|------------------------|
|              | Distanza [m] | Area [m <sup>2</sup> ] | Distanza [m] | Area [m <sup>2</sup> ] |
| PHAST        | 45           | 160                    | 50           | 183                    |
| FLACS        | 11           | 11,44                  | 14           | 20,3                   |
| Ansys Fluent | 17           | 24                     | 28           | 73                     |

Per la soglia SLOD, la distanza massima più contenuta è pari a 11 m, mentre quella più estesa raggiunge i 45 m: in pratica, la zona ad alta probabilità di morte può risultare quasi quattro volte più lunga a seconda del modello adottato. In termini di area la differenza è ancora più evidente: da 11 m<sup>2</sup> si arriva fino a 160 m<sup>2</sup>, con una superficie critica che passa da una zona molto localizzata a un'estensione significativamente più ampia.

La stessa tendenza si osserva per la soglia SLOT. La distanza varia tra 14 m e 50 m, mentre l'area passa da circa 20 m<sup>2</sup> a 183 m<sup>2</sup>. Questo significa che, a parità di scenario, la porzione di impianto classificata come “non accettabile” può essere quasi dieci volte maggiore.

Il quadro è perfettamente allineato con le curve di letalità: in FLACS, le aree SLOD/SLOT risultano fortemente localizzate, mentre in PHAST la classificazione a soglia amplifica ulteriormente l'estensione della zona critica.

Ansys Fluent si colloca tra questi due estremi, sia in termini di distanza sia di area, ma con una distribuzione spaziale più coerente con l'interazione con la geometria e con la reale evoluzione del pennacchio.

In sintesi, l'analisi SLOT/SLOD rende ancora più evidente che la scelta del modello non incide solo sul dettaglio della curva, ma può modificare in modo sostanziale la superficie

complessiva definita come area a rischio, con impatti diretti sulla progettazione dell'impianto e sulle distanze di sicurezza.

### 6.5.2 Vulnerabilità umana: effetti criogenici

Oltre agli effetti asfissianti, il rilascio di CO<sub>2</sub> liquida comporta un rischio criogenico diretto per il personale esposto, legato alle basse temperature generate dall'espansione rapida del getto e dalla possibile formazione di fase solida.

Come discusso nell'analisi dei campi di temperatura, i tre modelli mostrano differenze significative nella previsione della temperatura minima e nella persistenza del raffreddamento lungo la direzione di propagazione. Tuttavia, la sola temperatura statica non è sufficiente a descrivere il rischio di lesione cutanea, poiché il danno criogenico dipende dall'effetto combinato di temperatura e velocità del flusso.

Per questo motivo è stato considerato il concetto di *Wind Chill Temperature* [28], che integra temperatura del pennacchio e velocità del flusso, fornendo un indicatore più realistico del tempo di congelamento della pelle esposta.

#### Vulnerabilità termica basata su soglie di temperatura

Le linee guida IOGP propongono un modello semplificato per la valutazione della vulnerabilità del personale in caso di rilascio di fluidi criogenici, correlando la temperatura del rilascio alla probabilità di letalità. Il modello distingue tra due scenari limite: esposizione a gas/vapore freddo e impatto diretto di liquido/spray criogenico, fornendo curve continue di letalità (Figura 5) in funzione della temperatura.

Le soglie di letalità utilizzate per l'analisi vengono riportate in Tabella 21.

Tabella 21 - Limiti di letalità IOGP

| Letalità | Temperatura [°C] |                  |
|----------|------------------|------------------|
|          | Rilascio gassoso | Rilascio liquido |
| 1%       | -75              | -20              |
| 50%      | -150             | -40              |
| 100%     | -180             | -60              |

In Figura 62 sono riportati i profili di temperatura ottenuti dai tre modelli con i limiti appena definiti di letalità.

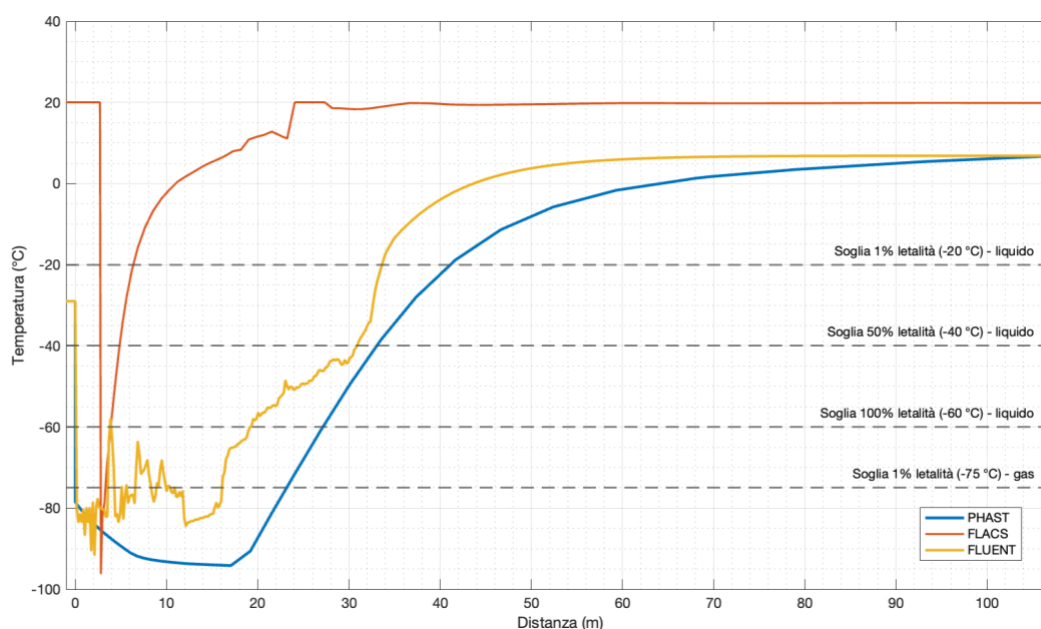


Figura 62 - Profili di temperatura dei tre software con soglie limite di esposizione per il personale (IOGP)

Come si osserva dalla figura, l'utilizzo esclusivo delle soglie definite per il rilascio gassoso risulta poco significativo per la definizione di distanze critiche, poiché le temperature simulate non raggiungono mai i livelli associati a letalità del 50% e del 100%, mentre la soglia dell'1% viene superata solo in una porzione molto limitata dell'area prossima alla sorgente. Tale criterio tenderebbe quindi a sottostimare la severità nel campo vicino al rilascio.

Al contrario, l'adozione delle soglie definite per il rilascio liquido porta a una classificazione eccessivamente conservativa per lo scenario analizzato, estendendo la

zona a letalità elevata anche in assenza di un impatto diretto di liquido criogenico. Il rilascio considerato è infatti di natura bifase, con espansione gassosa e formazione di particelle solide e non assimilabile a u getto liquido continuo.

Ne consegue che nessuna delle due curve rappresenta in modo completo il comportamento reale del rilascio, che si colloca in una condizione intermedia tra i due estremi proposti da IOGP.

#### Vulnerabilità termica basata sulla *wind chill temperature* $T_{wc}$

Per superare il limite delle curve IOGP, è stato adottato il parametro di *Wind Chill Temperature* [28], che combina la temperatura del pennacchio con la velocità del flusso e consente una lettura più operativa del rischio di congelamento cutaneo. L'analisi è stata sviluppata confrontando le temperature previste con le quattro classi di rischio riportate in Tabella 22, che correlano la temperatura equivalente alla severità dell'effetto sulla pelle esposta.

Tabella 22 - Temperatura di raffreddamento del vento e tempo di congelamento della pelle esposta [28]

| Classificazione del rischio | $T_{wc}$ (°C) | Effetto                                                            |
|-----------------------------|---------------|--------------------------------------------------------------------|
| 1                           | -10 / -24     | Freddo sgradevole                                                  |
| 2                           | -25 / -34     | Molto freddo, rischio di congelamento della pelle                  |
| 3                           | -35 / -59     | Freddo intenso, la pelle esposta può congelare entro 10 minuti     |
| 4                           | -60 / colder  | Estremamente freddo, la pelle esposta può congelare entro 2 minuti |

Questo approccio è applicabile in modo rigoroso al modello Fluent (Figura 63), poiché richiede campi coerenti di temperatura e velocità locale, non disponibili nei risultati puntuali degli altri codici.

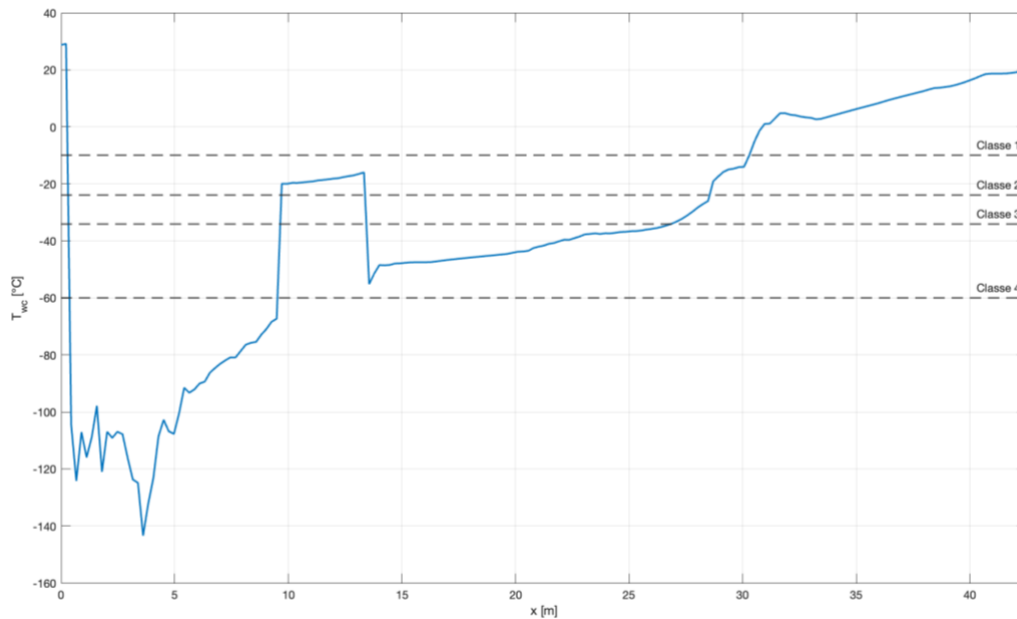


Figura 63 - Wind Chill Temperature con classi di rischio per il modello di Ansys Fluent

Il profilo  $T_{wc}$  evidenzia in modo chiaro come la severità criogenica non sia descrivibile in maniera adeguata dalla sola temperatura statica.

Le condizioni estreme (Classe 4, congelamento della pelle in meno di 2 minuti) risultano confinate entro circa 10 m dal punto di rilascio mentre la Classe 3 si estende fino a circa 25 m. Le classi 2 e 1 raggiungono rispettivamente 27 m e 30 m, indicando che, pur diminuendo la severità, l'effetto combinato di temperatura e velocità permane su distanze non trascurabili.

Il confronto con le distanze basate sulla sola temperatura evidenzia come l'introduzione della componente dinamica modifichi in modo sostanziale la lettura del rischio. La soglia termica fornisce una delimitazione più generica, mentre la *wind chill temperature*, includendo l'effetto della velocità del flusso, permette di distinguere con maggiore precisione la zona realmente critica nell'area attorno al rilascio da quella a rischio moderato ma più estesa.

#### Vulnerabilità termica: confronto

Il confronto tra il criterio basato su temperatura statica e l'approccio basato  $T_{wc}$  evidenzia differenze significative soprattutto per la severità massima. In Tabella 23 vengono riportate le distanze ai limiti di soglia per entrambi gli approcci. È stata definita

paragonabile a una severità massima (100% di letalità) la classe 4, severità moderata (50%) la classe 2 e severità lieve (1%) la classe 1.

Tabella 23 - Confronto soglie di letalità tra criterio IOGP e approccio  $T_{wc}$

| Letalità                | Distanza [m] |          |
|-------------------------|--------------|----------|
|                         | IOGP         | $T_{wc}$ |
| Severità lieve (1%)     | 33           | 30       |
| Severità moderata (50%) | 30           | 25       |
| Severità massima (100%) | 20           | 9        |

La soglia del 100% di letalità dimostra che il criterio IOGP risulta più conservativo nel campo prossimo, in quanto basato su una correlazione puramente termica. Per le severità lieve e moderata, le distanze risultano invece comparabili, mostrando che il modello IOGP, pur semplificato, fornisce una stima coerente dell'estensione complessiva dell'area a rischio. La differenza risiede principalmente nella classificazione della zona più critica.

Questo indica che IOGP tende a sovrastimare la severità massima, mentre la  $T_{wc}$  consente una distinzione più vicina alla reale dinamica del rilascio, senza alterare in modo significativo l'estensione della zona a rischio.

### 6.5.3 Vulnerabilità umana: sintesi

Considerando che asfissia ed effetti criogenici agiscono simultaneamente, è opportuno valutarne comparativamente l'impatto in termini di letalità per individuare il meccanismo più gravoso nello scenario analizzato.

Il confronto è stato condotto limitatamente al modello Fluent, poiché rappresenta l'unico caso in cui la vulnerabilità criogenica è stata valutata mediante la  $T_{wc}$ , garantendo coerenza con i criteri utilizzati per la valutazione della vulnerabilità tossica.

Vengono riportate in Tabella 24 le distanze massime definite per i livelli di letalità del 100% e del 50% determinate assumendo come riferimento, rispettivamente per il caso

dell'asfissia, il limite NORSOK per esposizione inferiore a 5 minuti (150000 ppm) e il limite NORSOK per esposizione di 10 min (105000 ppm).

*Tabella 24 - Distanze dei limiti di letalità per asfissia ed effetti criogenici*

| Letalità | Asfissia [m] | Effetti criogenici [m] |
|----------|--------------|------------------------|
| 50%      | 28           | 25                     |
| 100%     | 19           | 9                      |

Il confronto evidenzia che i due meccanismi presentano una diversa distribuzione della severità lungo la direzione di propagazione. I due meccanismi producono estensioni comparabili nella fascia di severità intermedia, mentre differiscono in modo netto nella severità massima. In particolare, l'asfissia mantiene una zona a letalità certa più estesa rispetto all'effetto criogenico, che risulta invece più confinato nel campo prossimo del rilascio.

Questo indica che l'effetto criogenico rappresenta un pericolo molto intenso ma localizzato, mentre il rischio asfissiante costituisce il vettore principale per le condizioni più gravose su scala spaziale più ampia. Di conseguenza, le misure di mitigazione dovrebbero privilegiare la riduzione dell'esposizione asfissiante nelle aree estese, senza trascurare la protezione specifica nelle zone limitrofe al punto di rilascio per gli effetti termici più severi.

#### 6.5.4 Vulnerabilità delle strutture

Nel caso di strutture in acciaio, l'esposizione criogenica non determina automaticamente la rottura del componente, ma può ridurre drasticamente la tenacità a frattura e favorire la transizione verso il comportamento fragile, mostrando il fenomeno della transizione duttile fragile. La DBTT (*Ductile to Brittle Transition temperature*) per gli acciai al carbonio e basso legati si colloca in un intervallo ampio, tra -50°C e -100°C, in funzione di composizione, spessore e stato metallurgico.

È importante sottolineare che la DBTT non rappresenta una temperatura di rottura, ma individua condizioni nelle quali la frattura fragile può diventare possibile in presenza di

tensioni. Nel caso di un rilascio incidentale di CO<sub>2</sub> liquida, tali tensioni sono plausibili per effetto del raffreddamento rapido e dell’impatto del getto bifase con presenza di particelle solide, che può indurre sollecitazioni meccaniche localizzate e amplificare il rischio di innesco di cricche superficiali.

In accordo con quanto appena detto, è stato considerato un riferimento operativo in ambito O&G per la valutazione di danni criogenici su apparecchiature e strutture non protette. Tali criteri introducono esplicitamente una dipendenza dalla durata di esposizione, definendo condizioni di danneggiamento severo in funzione di temperatura e tempo (Tabella 25).

*Tabella 25 - Limiti di esposizione per la vulnerabilità delle strutture*

| Temperatura [°C] | Esposizione [min] | Probabilità di rottura |
|------------------|-------------------|------------------------|
| -73°C            | > 15 min          | 100%                   |
| -63°C            | > 10 min          | 100%                   |
| -40°C            | > 5 min           | 100%                   |

Questa impostazione risulta particolarmente utile per distinguere tra raffreddamenti molto intensi ma brevi, che possono generare shock termico localizzato, e condizioni più moderate ma persistenti, che aumentano la probabilità di perdita di integrità e funzionalità. Nel seguito, tali soglie sono state utilizzate come riferimento per interpretare i campi termici ottenuti dai modelli e valutare la plausibilità di condizioni compatibili con danneggiamento strutturale severo.

#### Analisi dei criteri di vulnerabilità

L’analisi della vulnerabilità strutturale richiede la valutazione di grandezze locali quali temperatura in prossimità della superficie, durata di esposizione sottosoglia e possibile impatto del getto bifase. Tali informazioni non sono ricavabili in modo diretto da modelli integrali, né da configurazioni CFD che adottano sorgenti equivalenti puramente gassose.

Per questo motivo, la valutazione strutturale dettagliata è stata sviluppata principalmente co riferimento al modello Fluent che consente la risoluzione tridimensionale del campo termico e di moto e l’estrazione di grandezze locali sulle superfici strutturali.

Per PHAST e FLACS è stata invece effettuata una valutazione qualitativa basata sui profili longitudinali di temperatura, utile a fini comparativi ma non sufficiente per una stima locale dell'esposizione strutturale.

In Figura 64 è mostrata l'analisi longitudinale dei profili di temperatura, condotta per tutti i modelli lungo l'asse principale di propagazione.

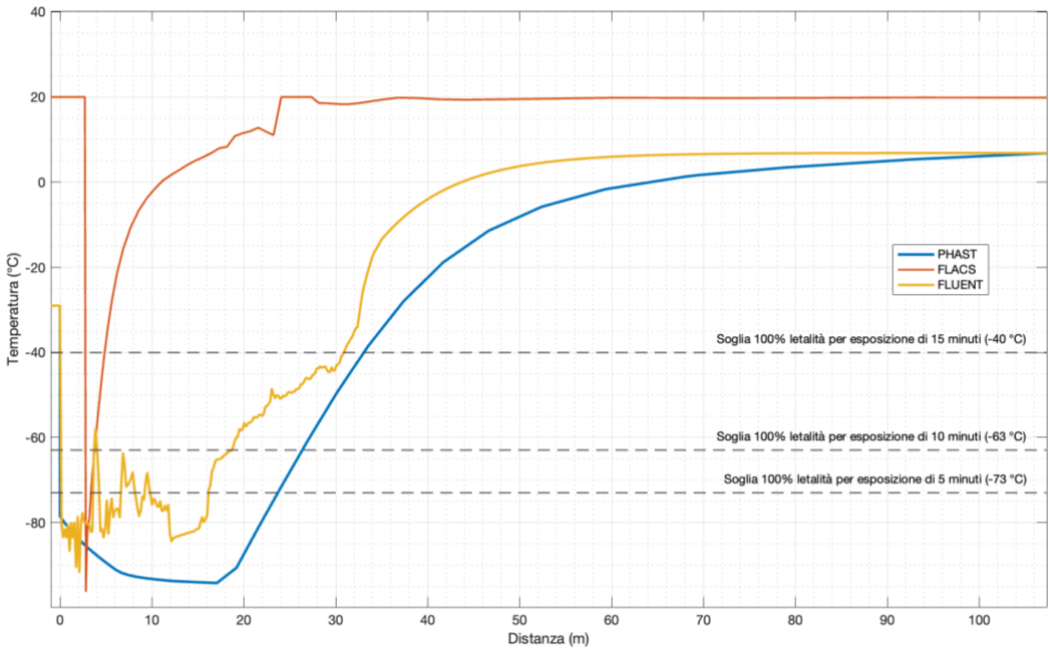


Figura 64 - Analisi longitudinale dei profili di temperatura per l'analisi della vulnerabilità strutturale

Il grafico appena mostrato fornisce una prima stima dell'estensione spaziale della zona criogenica. Considerando le soglie strutturali di riferimento è possibile definire le distanze limite come si vede in Tabella 26.

Tabella 26 - Distanze limite per analisi di vulnerabilità strutturale

| Limite                             | Distanza limite [m] |       |              |
|------------------------------------|---------------------|-------|--------------|
|                                    | PHAST               | FLACS | Ansys Fluent |
| -73°C per esposizione di 5 minuti  | 24                  | 2     | 16           |
| -63°C per esposizione di 10 minuti | 28                  | 3     | 18           |
| -40°C per esposizione di 15 minuti | 34                  | 4     | 31           |

Questi risultati evidenziano differenze significative tra i modelli nella stima delle distanze associate ai criteri temperatura-tempo. Il modello integrale fornisce sistematicamente le estensioni maggiori, riflettendo una rappresentazione mediata e conservativa del campo termico lungo l'asse di propagazione. FLACS restituisce invece distanze molto contenute, coerenti con una più rapida diluizione e con l'assenza di una modellazione della fase solida. Il modello costruito con Ansys Fluent si colloca in posizione intermedia, mostrando una previsione più equilibrata dell'esposizione strutturale. La variabilità osservata conferma che la stima delle distanze di danneggiamento è fortemente influenzata dal livello di dettaglio fisico adottato nella modellazione del rilascio.

L'analisi appena condotta preso come riferimento la temperatura del fluido lungo l'asse di rilascio. Tale grandezza non coincide però necessariamente con la temperatura effettivamente raggiunta dalle strutture investite dal rilascio. Anche all'interno dello stesso modello tridimensionale, la distinzione tra campo termico del getto e temperatura superficiale può condurre a valutazioni differenti dell'esposizione criogenica.

Per questo motivo, è stata estratta dal modello Fluent la temperatura direttamente dalle superfici strutturali (Figura 65), al fine di valutare l'effettiva interazione tra nube criogenica e geometria impiantistica.

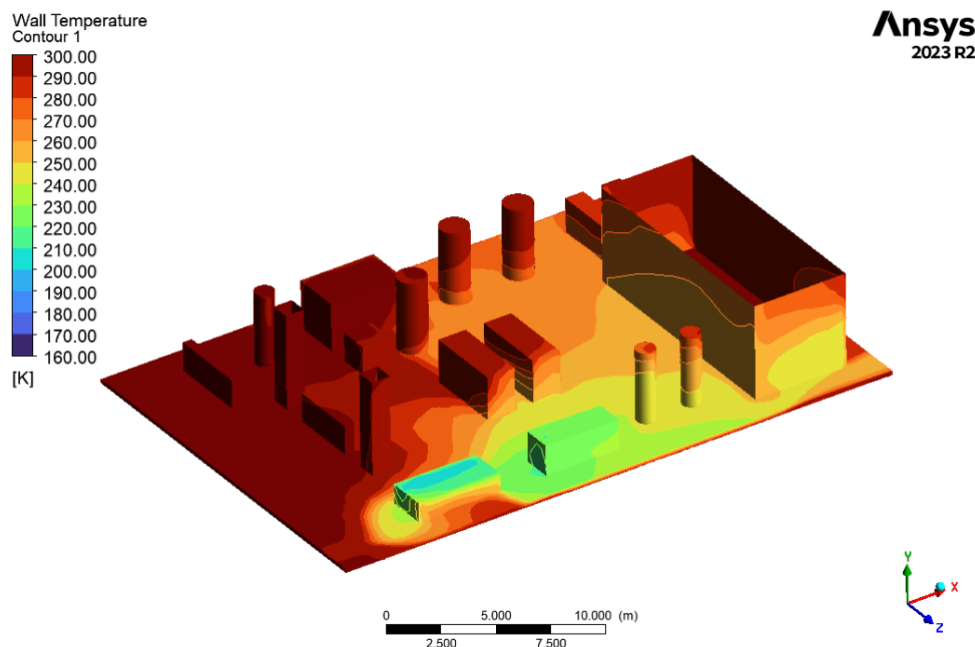


*Figura 65 - Mappa della distribuzione spaziale della temperatura sulle strutture*

L'analisi della temperatura superficiale evidenzia differenze sostanziali rispetto alla valutazione basata sul solo campo termico del fluido. Le distanze di superamento delle soglie risultano significativamente inferiori e la soglia più severa ( $-73^{\circ}\text{C}$ , ovvero 200 K) non viene praticamente raggiunta, se non in modo estremamente localizzato.

L'utilizzo della temperatura superficiale consente una lettura molto più rappresentativa del fenomeno: non solo si riduce l'estensione apparente della zona critica, ma diventa possibile individuare con precisione quali elementi strutturali siano effettivamente investiti dal getto, in funzione della direzione del vento e delle condizioni di impatto. Ne deriva una valutazione localizzata del rischio, più coerente con la realtà impiantistica e maggiormente utile ai fini progettuali rispetto a un'analisi basata esclusivamente sulla temperatura del fluido lungo l'asse di propagazione.

#### 6.5.5 Vulnerabilità strutturale: sintesi

Come si è potuto evincere dall'analisi, la valutazione della vulnerabilità strutturale in scenari di rilascio criogenico risulta intrinsecamente complessa. La letteratura disponibile è limitata e spesso frammentata, con dati sperimentali difficilmente generalizzabili e fortemente dipendenti da condizioni specifiche di pressione, geometria, materiale e dinamica del getto.

Di conseguenza, qualsiasi classificazione del danno strutturale deve essere interpretata come una valutazione di plausibilità ingegneristica piuttosto che come una previsione deterministica di rottura. In questo contesto, l'utilizzo di modelli CFD che consentono l'analisi locale dell'esposizione rappresenta uno strumento essenziale per ridurre l'incertezza, pur nella consapevolezza dei limiti intrinseci della modellazione numerica.



## 7 DISCUSSIONE FINALE, CONCLUSIONI E PROSPETTIVE FUTURE

L'obiettivo della tesi era analizzare criticamente gli strumenti oggi utilizzati nella QRA per la modellazione dei rilasci di CO<sub>2</sub>, con particolare attenzione alle differenze tra scenari gassosi e liquidi e alla loro influenza sulla valutazione della vulnerabilità umana e strutturale. Il presente lavoro si propone di contribuire all'affinamento delle metodologie utilizzate nell'analisi del rischio degli impianti di processo, con particolare riferimento agli scenari di rilascio incidentale di CO<sub>2</sub>. In questo contesto, il contributo innovativo della ricerca si articola in tre punti principali:

- Viene sviluppato un confronto critico tra i principali modelli attualmente disponibili per la simulazione dei rilasci incidentali di anidride carbonica, sia in fase gassosa sia liquida, analizzandone le differenze dal punto di vista modellistico e discutendo come tali differenze possano influenzare i risultati delle simulazioni e il grado di affidabilità delle previsioni;
- Il lavoro fornisce un contributo alla modellazione dettagliata dei rilasci di CO<sub>2</sub> liquida mediante simulazioni CFD condotte con Ansys Fluent, con particolare attenzione alla rappresentazione dei fenomeni termodinamici associati al rilascio e ai processi di dispersione della nube, sulla base delle più recenti evidenze scientifiche disponibili in letteratura;
- Viene proposta un'analisi sistematica dei criteri di vulnerabilità disponibili in letteratura, relativi sia agli effetti sulle persone sia ai possibili danni alle strutture, con l'obiettivo di integrarli in modo coerente con i risultati ottenuti dalla modellazione dei fenomeni incidentali.

Il lavoro ha mostrato come la CO<sub>2</sub>, pur essendo spesso percepita come meno critica di fluidi infiammabili, presenti in realtà problematiche di sicurezza industriale complesse, legate alla tossicità asfissiante, alla formazione di nubi dense e, nel caso di rilascio liquido, a fenomeni criogenici e multifase di notevole rilevanza.

Nel caso di rilascio gassoso, il confronto tra modelli ha evidenziato una buona coerenza tra gli strumenti analizzati. Le distanze di danno, le curve di letalità e i criteri dose-risposta

risultano generalmente comparabili e consentono una valutazione del rischio relativamente robusta anche con modelli semplificati. In questi scenari la scelta del software incide principalmente sul livello di dettaglio dell'analisi più che sulla classificazione finale del rischio.

Il quadro cambia radicalmente nel caso di rilascio di CO<sub>2</sub> liquida. L'introduzione dei fenomeni di evaporazione istantanea, della formazione di fase solida e degli effetti criogenici modifica profondamente la fisica del problema e rende la modellazione molto più sensibile alle ipotesi adottate. Il confronto sviluppato nella tesi mostra come strumenti diversi possano produrre risultati significativamente differenti in termini di estensione della nube, distribuzione termica e stima delle distanze di danno. Questa variabilità riflette i limiti strutturali dei modelli utilizzati:

- I modelli integrali tendono a fornire rappresentazioni conservative e fortemente semplificate dell'interazione con l'ambiente circostante;
- I modelli CFD che non rappresentano esplicitamente il comportamento bifase possono sottostimare alcuni effetti locali;
- La modellazione CFD *general-purpose* consente di rappresentare in modo coerente la dinamica del rilascio, l'interazione con la geometria e l'evoluzione del campo termico, sebbene richieda un impiego computazionale significativamente maggiore e una maggiore complessità nella fase di impostazione e analisi delle simulazioni.

Un ulteriore risultato rilevante riguarda la definizione dei criteri di vulnerabilità. Per la vulnerabilità umana esistono modelli consolidati, come funzioni Probit e il modello della dose tossica, che permettono di collegare in modo relativamente robusto le concentrazioni simulate alle probabilità di danno. Al contrario, criteri sulla vulnerabilità umana e strutturale legata agli effetti criogenici risultano molto meno definiti. La letteratura disponibile è limitata e spesso frammentata e molti criteri utilizzati in ambito industriale derivano da contesti differenti, come il settore dell'LNG.

Questo aspetto introduce un livello di incertezza significativo nelle valutazioni di rischio, soprattutto quando si considerano fenomeni criogenici complessi come quelli associati ai rilasci di CO<sub>2</sub> liquida. L'analisi svolta nella tesi mostra chiaramente come la classificazione del rischio strutturale possa cambiare in modo sostanziale a seconda della

grandezza utilizzata (temperatura del fluido o temperatura superficiale delle strutture) e del livello di dettaglio della simulazione.

Dal punto di vista applicativo, questi risultati suggeriscono che le QRA relative a rilasci di CO<sub>2</sub> liquida non possano essere trattate con lo stesso livello di semplificazione normalmente adottato per altri scenari di dispersione gassosa. In particolare, in presenza di fenomeni criogenici e interazioni locali con strutture o apparecchiature, l'utilizzo di modelli tridimensionali avanzati può rappresentare uno strumento fondamentale per ottenere una valutazione più realistica del rischio.

La tesi evidenzia inoltre una lacuna più generale nel quadro metodologico attuale: manca ancora un approccio condiviso e sistematico per la valutazione dei rilasci di CO<sub>2</sub> liquida nelle analisi di rischio industriale. La definizione di linee guida specifiche per questi scenari rappresenta quindi una possibile direzione di sviluppo sia per la ricerca scientifica sia per la pratica ingegneristica.

Dal punto di vista della ricerca futura, risultano particolarmente interessanti due direzioni principali:

- Il miglioramento e la validazione dei modelli multifase per la simulazione dei rilasci in fase liquida di CO<sub>2</sub>, attraverso una maggiore integrazione tra modellazione CFD e prove sperimentali;
- Lo sviluppo di criteri di vulnerabilità strutturale più robusti e specifici per questi scenari. In grado di tenere conto non solo delle temperature raggiunte ma anche della dinamica del raffreddamento, della presenza di fase solida e delle caratteristiche di materiali.

In prospettiva, una migliore integrazione tra modellazione numerica, prove sperimentali e criteri ingegneristici potrebbe contribuire alla definizione di metodologie più affidabili per la valutazione del rischio associato alla CO<sub>2</sub>, riducendo le incertezze oggi presenti e migliorando la progettazione delle infrastrutture industriali.



# BIBLIOGRAFIA

- [1] NOAA, Global Monitoring Laboratory, *Global CO<sub>2</sub> Trends*, National Oceanic and Atmospheric Administration, Boulder (USA), (2025, Settembre 12).  
<https://gml.noaa.gov/ccgg/trends/global.html>
- [2] DNV, Mapping of potential HSE issues related to large-scale capture, transport and storage of CO<sub>2</sub>. Det Norske Veritas, Hovik, Norvegia, **5**, (2008)
- [3] Backhouse F., Lake Nyos disaster (1986): Description, Deaths, & Facts, Encyclopaedia Britannica (1986)  
<https://www.britannica.com/event/Lake-Nyos-disaster>
- [4] Consiglio Europeo, *Fit for 55*, Unione Europea, Bruxelles (2021).  
<https://www.consilium.europa.eu/it/policies/fit-for-55/>
- [5] MASE (Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica), Studio CCUS: Analisi degli aspetti tecnici, economici e normativi funzionali allo sviluppo della filiera CCUS, Roma (2025).  
[https://www.mase.gov.it/portale/documents/d/guest/mase\\_studio\\_ccus\\_2025-pdf](https://www.mase.gov.it/portale/documents/d/guest/mase_studio_ccus_2025-pdf)
- [6] Topham, Carbon Dioxin. In: Ullmann's Encyclopaedia of Industrial Chemistry, Wiley-VCH (2005).
- [7] Metz, B., Davidson, O., Coninck H.C, Loos M., & Mayer L., IPCC Special Report on Carbon Dioxide Capture and Storage. Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), Cambridge University Press, 2005.
- [8] Mocellin P., Modellazione del rilascio e della ricaduta al suolo di CO<sub>2</sub> da pipeline per carbon capture and storage, Tesi di laurea magistrale, Università degli studi di Padova (2013).  
[https://thesis.unipd.it/handle/20.500.12608/17580?1/Paolo\\_Mocellin\\_Modellazione\\_del\\_rilascio\\_e\\_della\\_ricaduta\\_al\\_suolo\\_di\\_CO2\\_da\\_pipeline\\_CCS.pdf](https://thesis.unipd.it/handle/20.500.12608/17580?1/Paolo_Mocellin_Modellazione_del_rilascio_e_della_ricaduta_al_suolo_di_CO2_da_pipeline_CCS.pdf)
- [9] Bielka P., Kuczyński S., Włodek T., Nagy S, Risks and Safety of CO<sub>2</sub> Pipeline Transport: A Case Study of the Analysis and Modeling of the Risk of Accidental Release of CO<sub>2</sub> into the Atmosphere, *Energies*, 17(16), (2024).

<https://www.mdpi.com/1996-1073/17/16/3943>

- [10] Oldenburg, C. M, Joule-Thomson cooling due to CO<sub>2</sub> injection into natural gas reservoirs. *Energy Conversion and Management*, (2007).  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0196890407000349>
- [11] Chacin A., Vázquez J. M., Müller E. A., Molecular simulation of the Joule–Thomson inversion curve of carbon dioxide, *Fluid Phase Equilibria*, (1999).  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381299002642>
- [12] IOGP - International Association of Oil&Gas Producers. RISK ASSESSMENT DATA DIRECTORY Vulnerability of humans. In Report 434-14, Londra, (2023).
- [13] Ellingsen, I., Sydnese, G., Hauge, A., Liestol, K., & Nicolaysen, G., CO<sub>2</sub> sensitivity in humans breathing 1 or 2% CO<sub>2</sub> in air. *British Journal of Industrial Medicine*, (1987)  
<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/3107346/>
- [14] Spitzenberger, C., & Flechas, T., Carbon Dioxide Major Accident Hazards Awareness. AIChE – American Institute of Chemical Engineers, (2023).  
<https://www.aiche.org/sites/default/files/cep/20230633.pdf>
- [15] DNV, GUIDANCE ON CCS CO<sub>2</sub> SAFETY AND ENVIRONMENT MAJOR ACCIDENT HAZARD RISK MANAGEMENT, Level 3 - Generic Guidance. Det Norske Veritas, (2023)
- [16] Bragin, L., & Voronkov, I, Sensitivity of the respiratory center to carbon dioxide during prolonged exposure of humans to gas environment with unchanging level of hypercapnia. *Human Physiology* (1999).  
<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/10399550/>
- [17] NIOSH, Documentation for Immediately Dangerous to Life or Health Concentrations (IDLH): Carbon dioxide. National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH), (1994)  
<https://www.cdc.gov/niosh/idlh/124389.html>

- [18] HSE, NORSOK Z-013, Risk and emergency preparedness assessment. Health and Safety Executive (2010).
- [19] Gallo, A, Analysis of the state of the art of vulnerability and impairment thresholds associated to physical effects of a CO<sub>2</sub> release. Application to the Allam cycle case study. Tesi di laurea magistralae, Politecnico di Torino (2021)  
<https://webthesis.biblio.polito.it/secure/20884/1/tesi.pdf>
- [20] Duong, H., & Patel, G, Hypothermia. In: *StatPearls*. StatPearls Publishing (2024).  
<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK545239/>
- [21] Rettner, R, How Does a Person Freeze to Death?. Live science (2019)  
<https://www.livescience.com/6008-person-freeze-death.html>
- [22] Vianello, C., Mocellin, P., & Maschio, G., Study of Formation, Sublimation and Deposition of Dry Ice from Carbon Capture and Storage Pipelines. The Italian Association of Chemical Engineering, (2014).
- [23] Mocellin, P., Vianello, C., & Maschio, G., Hazard investigation of dry-ice bank induced risks related to rapid depressurization of CCS pipelines: Analysis of different numerical modelling approaches., (2019).  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1750583616303280>
- [24] Anoop, C., Singh, R., Kumar, R., Jayalakshmi, M., Antony Prabhu, T., Thomas Tharian, K., & Narayana Murty, S., A Review on Steels for Cryogenic Applications. ASTM International, (2021).
- [25] RIVM, Probit Function Technical Support Document – Carbon Dioxide. RIVM Report 2022-0081, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven, Paesi Bassi, (2022)  
<https://www.rivm.nl/sites/default/files/2022-06/20220608-carbon%20dioxide-INHOUDELIJK%20VASTGESTELD.pdf>
- [26] Vysus Group (per DSB – Directorate for Civil Protection and Emergency Planning). Guidelines for Quantitative Risk Analysis of Facilities. Report No. 106535/R1 Rev A, DSB, Tønsberg, Norvegia. (2021)

[https://www.dsb.no/siteassets/rapporter-og-publikasjoner/rapporter/prj11100262033\\_final\\_report\\_rev\\_2021-2.pdf](https://www.dsb.no/siteassets/rapporter-og-publikasjoner/rapporter/prj11100262033_final_report_rev_2021-2.pdf)

- [27] HSE (UK), Toxicity levels of chemicals, Assessment of the Dangerous Toxic Load (DTL) for Specified Level of Toxicity (SLOT) and Significant Likelihood of Death (SLOD), (2022).

<https://www.hse.gov.uk/chemicals/haztox.htm>

- [28] Lou, Z., Wu, P., Wen, H., Wang, Y., Liu, C., Du, X., & Liu, L., Effect of source strength on the simulation of jet dispersion and hazard distances during accidental release of liquid CO<sub>2</sub>, (2024).

<https://pdf.sciencedirectassets.com/276831/1-s2.0-S0957582024X00026/1-s2.0-S095758202400079X/main.pdf?X-Amz-Security-Token=IQoJb3JpZ2luX2VjEBcaCXVzLWVhc3QtMSJHMEUCIQCVxMCMf04iuOvBUmNJWWoBMmE4Tow%2B1URg9jVEZS8sYgIgVVUBi2H%2FF6rbyFX6DQyvz90qJ3zZgVxaKk6sHggk>

- [29] Roos, i. A., Methods for the determination of possible damage to people and objects resulting from release of hazardous materials CPR 16E. Voorburg, Chapter 3, p. 23., (1989).

<https://publications.tno.nl/publication/34634118/X2BfNj/TNO-1992-greenbook.pdf>

- [30] Xiaoguang, W., Huang, Z., Zhao, H., & Zhang, S., A transient fluid-thermo-structural coupling study of high-velocity LN<sub>2</sub> jet impingement on rocks, (2019).

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1365160918305756>

- [31] Wu P., Liu C., Wen H., Luo Z, Zan S., Mi W, Experimental investigation of jet impingement during accidental release of liquid CO<sub>2</sub>, (2023).

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544223014433>

- [32] Dzido A., Krawczyk P., Badyda K., Chondrokostas P., Operational parameters impact on the performance of dry-ice blasting nozzle, (2021).

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S036054422031954X>

- [33] Chen J., Yang R., Li J., Huang Z., Zang B., Quin Z., Numerical investigation of abrasive SC-CO<sub>2</sub> jet for horizontal well cavity completion in deep coal seams: Insights from a fluid-thermal-structural coupling model, (2024).

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431124011256>

- [34] Shang Y., Chen X., Wu P., Li Z., Yang M., Xing X., Jiao J., Li X., A new model for predicting characteristics of the near-field leakage in high-pressure CO<sub>2</sub> pipelines, (2025).  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2667143324000763>
- [35] Parlamento Europeo e Consiglio, *Direttiva 2013/30/UE del Parlamento europeo e del Consiglio, del 12 giugno 2013, sulla sicurezza delle operazioni in mare nel settore degli idrocarburi e che modifica la direttiva 2004/35/CE*, (2021).
- [36] Stato Italiano. (2015). Decreto Legislativo 26 giugno 2015, n. 105 – Attuazione della direttiva 2012/18/UE relativa al controllo del pericolo di incidenti rilevanti connessi con sostanze pericolose. Gazzetta Ufficiale della Repubblica Italiana, 161(SO 38).  
[https://www.isprambiente.gov.it/files/seveso-iii-1/DecretoLegislativo26giugno2015\\_105testointegraleG.U..pdf](https://www.isprambiente.gov.it/files/seveso-iii-1/DecretoLegislativo26giugno2015_105testointegraleG.U..pdf)
- [37] Britter, R. E., & McQuaid, J., Workbook on the Dispersion of Dense Gases, HSE Report, (1988).
- [38] Gerbec, M., Pontiggia, M., Antonioni, G., Tugnoli, A., Cozzani, V., Sbaouni, M., & Lelong, R., Comparison of UDM and CFD simulations of a time varying release of LPG in geometrical complex environment. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 45, 56-68, (2017)
- [39] Ermak, D. L., User's Manual for SLAB: An Atmospheric Dispersion Model for Denser-than-Air Releases. Lawrence Livermore National Laboratory, Report UCRL-MA-105607, (1990)
- [40] Spicer T. O., Havens J. A., & McClure J. W., DEGADIS Model Evaluation and Application to Heavy Gas Releases. Gas Research Institute, Report GRI-89/0247, (1989).
- [41] Havens J. A., & Spicer T. O., Development of an Improved Model for Dense Gas Dispersion. U.S. Department of Energy, (1985).

- [42] U.S. Environmental Protection Agency, *ALOHA Software (Areal Locations of Hazardous Atmospheres)*, (2026)  
<https://www.epa.gov/cameo/aloha-software>
- [43] Gexcon, *EFFECTS – Consequence modelling software for accidental release of hazardous substances*, (2025)  
<https://www.gexcon.com/software/effects/>
- [44] Ferziger, J. H., & Perić, M., *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 3<sup>o</sup> edizione, Springer, (2002).
- [45] Shen, S., Jiao, Z., Parker, T., Sun, Y., & Wang, Q. (2020). Recent application of Computational Fluid Dynamics (CFD) in process safety and loss prevention: A review. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 67, 104252.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950423020305398>
- [46] Gexcon, *FLACS User's Manual*, (2025).  
<https://www3.gexcon.com/files/packages/flacs-users-manual-25.2.pdf>
- [47] Pappalardo F, et al., “Comparison of CFD numerical approaches for the simulation of accidental gas release in energy applications”, (2020)  
<https://re.public.polimi.it/retrieve/e0c31c12-1de8-4599-e053-1705fe0aef77/4751.pdf>
- [48] ANSYS Inc., *Fluent Theory Guide*, Release 2024 R2, (2024).  
[https://ansyshelp.ansys.com/public/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v242/en/flu\\_th/flu\\_th.html](https://ansyshelp.ansys.com/public/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v242/en/flu_th/flu_th.html)
- [49] Alberto Moscatello, *Development and experimental validation of a novel CFD approach for the simulation of high-pressure accidental gas releases*, (2019)  
<https://iris.polito.it/handle/11583/2978996?mode=simple>
- [50] Gexcon AS, *CO<sub>2</sub> dispersion modelling in FLACS, FLUG 2022 [Webinar]*, (2022).  
<https://www.gexcon.com/resources/past-webinars/co2-dispersion-modelling-in-flacs/>
- [51] Carvalho, A. S. et al., “Peng-Robinson equation of state: 40 years through cubics”. *Fluid Phase Equilibria*, 448 (2017), 1-18  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381217301851>

- [52] Bruno E., Modellazione CFD di rilasci incidentali di H<sub>2</sub> e studio della validazione sperimentale, (2024)  
<https://webthesis.biblio.polito.it/30591/>
- [53] Zhang H., Yong Liu, Jiren Tang, Wenchuan Liu, Changjiang Chen, Investigation on the fluctuation characteristics and its influence on impact force of supercritical carbon dioxide jet, (2022)  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544222010283?via=ihub>
- [54] Wallis, G.B., One-dimensional two-phase flow. Courier Dover Publications, (2020)  
[https://books.google.it/books?hl=it&lr=&id=rG8HEAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP2&ots=ZZyzUuXfT6&sig=JlQr8DWCpPZ0PbMuhPrsueBNkJ0&redir\\_esc=y#v=onepage&q&f=false](https://books.google.it/books?hl=it&lr=&id=rG8HEAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP2&ots=ZZyzUuXfT6&sig=JlQr8DWCpPZ0PbMuhPrsueBNkJ0&redir_esc=y#v=onepage&q&f=false)
- [55] Guddal B.M., “Validation and Comparative Analysis of FLACS-CFD and Phast for Ammonia Release and Dispersion”, (2025)  
<https://bora.uib.no/bora-xmlui/handle/11250/3204271>



# APPENDICE A: Impostazione dei modelli

Questa appendice descrive nel dettaglio tutte le fasi operative seguite per l'impostazione, l'esecuzione e l'analisi delle simulazioni condotte con i vari software.

## A.1 PHAST

Tipologia di scenario:

- Software: DNV PHAST v9.;
- Tipologia di analisi: dispersione di gas tossico;
- Scenari simulati:
  - Toxic Gas Release (rilascio in fase gassosa);
  - Toxic Liquid Release (rilascio in fase liquida).

Condizioni ambientali:

- Velocità del vento: 6 m/s (riferita a 10 m);
- Temperatura ambiente: 300 K;
- Rugosità superficiale: terreno industriale (default PHAST);
- Altezza di valutazione: 1,5 m (livello di respirazione).

Definizione della sorgente:

- Tipo di sorgente: Leak;
- Altezza del foro: 1,5 m;
- Orientamento del rilascio: orizzontale, allineato alla direzione del vento;
- Regime di rilascio: stazionario;
- Volume del vessel: non specificato (rilascio continuo).

Proprietà della sostanza:

- Sostanza: Anidride carbonica (CO<sub>2</sub>), definita come tossica;
- Proprietà fisiche: importate dal database termodinamico interno;
- Stato del fluido: definito manualmente in funzione delle condizioni operative.

Rilascio in fase gassosa:

- Pressione a monte: 50 bar;
- Temperatura del fluido: 300 K;
- Diametro equivalente del foro: 30 mm;
- Stato termodinamico: gas.

PHAST calcola automaticamente la velocità di efflusso, la temperatura all'ugello, il diametro del getto e la dispersione lungo l'asse del vento.

Rilascio in fase liquida:

- Pressione a monte: 18,5 bar;
- Temperatura del fluido: 245,15 K;
- Diametro equivalente del foro: 30 mm;
- Stato termodinamico: liquido sottoraffreddato.

Il modello gestisce il flashing e la vaporizzazione parziale, stimando la frazione vaporizzata, la formazione di eventuale pool e la successiva dispersione della fase gassosa.

## A.2 FLACS

Informazioni generali:

- Software: FLACS-CFD v25.2 (Gexcon AS);
- Tipologia di analisi: dispersione di gas inerte in ambiente offshore.

Geometria e dominio:

- Modellazione CAD: SolidWorks;
- Geometria esportata in formato STL;
- Importazione tramite modulo CADS;
- Allineamento del sistema di riferimento (asse verticale Z in FLACS).

Definizione del rilascio gassoso:

- Temperatura del fluido: 300 K;
- Pressione del fluido: 50 bar;
- Tipo di sorgente: leak point;
- Modello di efflusso: Ewan-Moodie;
- Coefficiente di scarico: 0,85;
- Regime: stazionario;
- Durata del rilascio: 180 s.

Condizioni ambientali:

- Temperatura ambiente: 300 K;
- Pressione ambiente: 1 bar;
- Velocità del vento: 6 m/s;
- Direzioni del vento analizzate: 0° e 45°.

Griglia di calcolo:

- Mesh cartesiana uniforme;
- Raffinamento locale in prossimità dal rilascio;
- Stretching verso i confini del dominio;
- Verifica di indipendenza della mesh (variazioni <2%).

Monitor points:

- Numero di punti: 38;
- Variabili monitorate:
  - Concentrazione di CO<sub>2</sub>;
  - Pressione statica;
  - Velocità del flusso;
  - Densità;
- Frequenza di salvataggio: 0,1 s.

Rilascio in fase liquida:

FLACS non modella direttamente la termodinamica multifase. Il rilascio liquido è stato quindi rappresentato tramite una sorgente gassosa equivalente, ottenuta mediante calcoli esterni di:

- Portata massica;
- Densità equivalente;
- Area e diametro del getto.

I parametri risultanti sono stati inseriti manualmente nel Leak Wizard.

## A.3 Ansys Fluent

Impostazione generale:

- Software: Ansys Fluent 2023 R2
- Solver: pressure-based, transitorio, compressibile;
- Modello di gas reale: Peng-Robinson EOS (database NIST REFPROP);
- Modello di turbolenza: k- $\omega$  standard.

### A.3.1. Modellazione del rilascio gassoso – approccio SBAM

L'approccio adottato prevede due fasi:

- Fase 1: simulazione della Source Box per caratterizzare il getto iniziale;
- Fase 2: simulazione della dispersione utilizzando come input i dati all'uscita dalla SB.

La Source Box è dimensionata per garantire condizioni subsoniche all'uscita ( $L/D \geq 15$ ).

Mesh e impostazioni numeriche:

- Elementi: tetra/prisma;
- Raffinamento locale nella regione del getto;
- Discretizzazione: second order upwind;
- Residui di convergenza:  $< 10^{-5}$ ;
- Time step:  $110^{-4}$  s (adattivo,  $Co < 1$ )

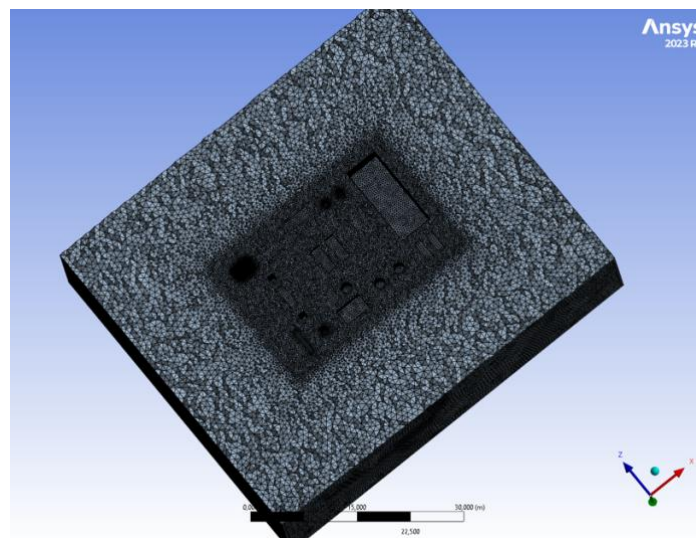


Figura 66 - Rappresentazione mesh modello SBAM

Condizioni al contorno:

- Inlet SB: velocity inlet (profili da SB);
- Inlet vento: velocity inlet (6 m/s);
- Outlet: pressure outlet (1 bar);
- Pareti: no-slip, adiabatiche.

### A.3.2. Modellazione del rilascio liquido

Il rilascio di CO<sub>2</sub> inizialmente in fase liquida è stato modellato in Ansys Fluent mediante una rappresentazione equivalente del getto dopo il rilascio. La modellazione non prevede la risoluzione diretta della termodinamica multifase del rilascio primario, ma utilizza come input una sorgente equivalente definita esternamente.

Nel dominio CFD, la dispersione è descritta considerando:

- Una fase continua, costituita dalla CO<sub>2</sub> in fase gassosa;
- Una fase discreta, costituita da particelle solide di CO<sub>2</sub> (ghiaccio secco), trattate mediante DPM.

I parametri della sorgente sono imposti come condizioni di ingresso e non vengono ricalcolati dal solver. La fase solida è iniettata con distribuzione granulometrica di tipo Rosin-Rammler, con velocità iniziale e temperatura coerenti con la sorgente equivalente.

Le proprietà termofisiche standard disponibili in Ansys Fluent non risultano sufficienti a descrivere accuratamente il comportamento della CO<sub>2</sub> alle basse temperature caratteristiche del rilascio criogenico. Per questo motivo:

- Le proprietà della CO<sub>2</sub> gassosa sono state definite come funzioni della temperatura;
- Le proprietà della CO<sub>2</sub> solida sono state introdotte tramite un database materiali personalizzato (file.scm);
- I termini di sorgente di massa ed energia associati alla sublimazione delle particelle solide sono stati implementati mediante *User Define Functions* (UDF).

L'interazione tra fase continua e fase discreta è gestita attraverso i termini di sorgente del modello DPM, senza ricorrere a modelli multifase completamente accoppiati.

### Sequenza operativa del modello

L'implementazione del modello in Ansys Fluent segue una procedura sequenziale:

- a. Creazione della geometria e denominazione delle superfici;
- b. Generazione della mesh poli-esaedrica con raffinamento locale nella regione del getto;
- c. Importazione delle UDF e del database dei materiali personalizzato;
- d. Definizione delle proprietà dei materiali e delle fasi;
- e. Impostazione delle condizioni al contorno e delle iniezioni di DPM;
- f. Esecuzione della simulazione transitoria di dispersione.

Questo workflow garantisce coerenza tra la modellazione termodinamica esterna della sorgente e la successiva simulazione CFD della dispersione, concentrando l'analisi sugli effetti impiantistici e sulle aree di potenziale accumulo.

## APPENDICE B: Definizione del tool per il calcolo della *pseudo source*

```
function out = CO2_release_hybrid_clean()

%% Inputs
fluid = 'CO2';

p0 = 18.5e5; % Pa
T0 = 244.65; % K
p_amb = 1e5; % Pa

d_noz = 0.030; % m
A_noz = pi*(d_noz/2)^2;

p1 = 11.0e5; % Pa (must be > ptripple*1.001)
Cd = 0.85; % (-)

Q_ref = 0.10;
n_shape = 2.0;
alpha_min = 0.15;

x_eval = 0.50; % m
use_D_target = true;
D_target = 0.30; % m
theta_deg = 12; % deg, used if use_D_target=false

n_scan = 250;

%% CoolProp wrapper
Props = @(out,in1,v1,in2,v2)
double(py.CoolProp.CoolProp.PropsSI(out,in1,v1,in2,v2,fluid));

%% Below-triple (V+S) constants
VS.Rco2 = 188.924; % J/(kg K)
VS.Tref = 194.65; % K
VS.Pref = 101325; % Pa
VS.h_sub = 571e3; % J/kg
VS.rho_s = 1562; % kg/m^3

p_tri = 517964; % Pa
T_tri = 216.592; % K

if p1 <= p_tri*1.001
    error('p1 must be > ptripple*1.001.');
```

end

```

%% State 0 (tank)
st0.p = p0; st0.T = T0;
st0.rho = Props('D','P',p0,'T',T0);
st0.h = Props('H','P',p0,'T',T0);
st0.s = Props('S','P',p0,'T',T0);

%% State 1 (isoenthalpic to p1)
st1 = state_PH_LVaware(Props, p1, st0.h);

if isfield(st1,'x_v') && isfinite(st1.x_v)
    Q1 = st1.x_v;
else
    Q1 = Props('Q','P',p1,'H',st0.h);
    if ~isfinite(Q1), Q1 = 0; end
end
Q1 = max(Q1,0);

%% Nozzle: upper bound (liquid Bernoulli)
rho_L = st0.rho;
dp = max(0, p0 - p_amb);
v_L = Cd * sqrt(2*dp / rho_L);
m_dot_L = rho_L * A_noz * v_L;

%% Nozzle: lower bound (HEM choked from state 1)
[st2_HEM, Gstar_HEM] = nozzle_HEM_choked(Props, st1, p_amb, p_tri, n_scan);
m_dot_HEM = Cd * A_noz * Gstar_HEM;

%% Hybrid blend
alpha = 1 / (1 + (Q1/Q_ref)^n_shape);
alpha = min(1.0, max(alpha, alpha_min));

m_dot = (1-alpha)*m_dot_HEM + alpha*m_dot_L;

st2 = st2_HEM;
st2.m_dot = m_dot;
st2.alpha = alpha;

%% State 2' (ambient, isoenthalpic; V+S aware below triple)
st2p = state_PH_VSaware_belowTriple(Props, p_amb, st2.h, VS, p_tri, T_tri);
st2p.m_dot = m_dot;

%% Plume at x_eval
if use_D_target
    theta = atan( max(0,(D_target - d_noz)) / (2*x_eval) );
else
    theta = deg2rad(theta_deg);
end

```

```

D_x = d_noz + 2*x_eval*tan(theta);
A_x = pi*(D_x/2)^2;
u_mix_x = m_dot/(st2p.rho * A_x);

%% Outputs
out.inputs =
struct('p0',p0,'T0',T0,'p1',p1,'p_amb',p_amb,'d_noz',d_noz,'A_noz',A_noz,...
.
'Cd',Cd,'Q_ref',Q_ref,'n_shape',n_shape,'alpha_min',alpha_min,...
'x_eval',x_eval,'use_D_target',use_D_target,'D_target',D_target,'theta_deg'
,theta_deg,...
'n_scan',n_scan);

out.state0 = st0;
out.state1 = st1;
out.state2 = st2;
out.state2p = st2p;

out.nozzle =
struct('Q1',Q1,'alpha',alpha,'m_dot',m_dot,'m_dot_L',m_dot_L,'m_dot_HEM',m_
dot_HEM,'Gstar_HEM',Gstar_HEM);
out.plume = struct('x',x_eval,'theta',theta,'D_x',D_x,'u_mix_x',u_mix_x);
end

%% ----- Local functions -----

function st = state_PH_LVaware(Props, p, h)
st.p = p; st.h = h;

Q = Props('Q','P',p,'H',h);
if isfinite(Q) && Q>=0 && Q<=1
    Tsat = Props('T','P',p,'Q',0);
    sL = Props('S','P',p,'Q',0);
    sV = Props('S','P',p,'Q',1);
    rhoL = Props('D','P',p,'Q',0);
    rhoV = Props('D','P',p,'Q',1);

    xV = Q; xL = 1-xV;
    st.T = Tsat;
    st.s = xV*sV + xL*sL;
    st.rho = 1/(xV/rhoV + xL/rhoL);

    st.x_v = xV; st.x_l = xL; st.x_s = 0.0;
else
    st.T = Props('T','P',p,'H',h);
    st.s = Props('S','P',p,'H',h);
    st.rho = Props('D','P',p,'H',h);

```

```

    st.x_v = NaN; st.x_l = NaN; st.x_s = NaN;
end
end

function [st2, Gstar] = nozzle_HEM_choked(Props, st1, p_amb, p_tri, n_scan)
p_min = max(p_amb, p_tri*1.001);
p_max = st1.p;

s1 = st1.s;
h1 = st1.h;

p_grid = logspace(log10(p_min), log10(p_max), n_scan);

Gbest = -Inf;
st_best = struct();

for i = 1:numel(p_grid)
    p = p_grid(i);
    try
        h = Props('H','P',p,'S',s1);
        rho = Props('D','P',p,'S',s1);
        T = Props('T','P',p,'S',s1);
    catch
        continue
    end

    dh = h1 - h;
    if dh <= 0
        G = 0;
    else
        u = sqrt(2*dh);
        G = rho*u;
    end

    if G > Gbest
        Gbest = G;
        st_best.p = p; st_best.T = T; st_best.h = h;
        st_best.s = s1; st_best.rho = rho;
        try
            Q = Props('Q','P',p,'H',h);
            if isfinite(Q) && Q>=0 && Q<=1
                st_best.x_v = Q; st_best.x_l = 1-Q;
            else
                st_best.x_v = NaN; st_best.x_l = NaN;
            end
        catch
            st_best.x_v = NaN; st_best.x_l = NaN;
        end
    end
end

```

```

    end
end

if ~isfinite(Gbest) || Gbest<=0
    error('HEM choking search failed.');
```

```

end

st2 = st_best;
Gstar = Gbest;
end

function st = state_PH_VSaware_belowTriple(Props, p, h, VS, p_tri, T_tri)
st.p = p; st.h = h;

if p >= p_tri
    st = state_PH_LVaware(Props, p, h);
    return
end

T_subl = 1 / ( (1/VS.Tref) - (VS.Rco2/Vs.h_sub)*log(p/Vs.Pref) );

h_v_tri = Props('H','P',p_tri,'Q',1);
s_v_tri = Props('S','P',p_tri,'Q',1);
cp_v_tri = Props('C','P',p_tri,'Q',1);

h_g = h_v_tri + cp_v_tri*(T_subl - T_tri);
s_g = s_v_tri + cp_v_tri*log(T_subl/T_tri) - VS.Rco2*log(p/p_tri);
rho_g = p/(VS.Rco2*T_subl);

if h >= h_g
    T_g = T_tri + (h - h_v_tri)/cp_v_tri;
    if T_g < T_subl, T_g = T_subl; end
    st.T = T_g;
    st.rho = p/(VS.Rco2*st.T);
    st.s = s_v_tri + cp_v_tri*log(st.T/T_tri) - VS.Rco2*log(p/p_tri);
    st.x_v = 1.0; st.x_s = 0.0; st.x_l = 0.0;
else
    x_s = (h_g - h)/VS.h_sub;
    x_s = max(0, min(1, x_s));
    x_v = 1 - x_s;

    st.T = T_subl;
    st.rho = 1/(x_v/rho_g + x_s/Vs.rho_s);
    st.s = x_v*s_g; % approx
    st.x_v = x_v; st.x_s = x_s; st.x_l = 0.0;
end
end

```

## APPENDICE C: Definizione del *User Defined Material Database*

```

;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;
;;;
;;;          Fluent USER DEFINED MATERIAL DATABASE          ;;;
;;;
;;; (name type[fluid/solid] (chemical-formula . formula)    ;;;
;;;       (prop1 (method1a . data1a) (method1b . data1b)) ;;;
;;;       (prop2 (method2a . data2a) (method2b . data2b))) ;;;
;;;
;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;

(
  (co2-solid droplet-particle
    (chemical-formula . co2<s>)
    (density (constant . 1562.))
    (specific-heat (constant . 54.55))
    (thermal-conductivity (constant . 0.08599999999999999))
    (molecular-weight (constant . 44.00995))
    (latent-heat (constant . 573000.))
    (vapor-pressure (constant . 0.) (polynomial piecewise-linear
(85. . 78897.) (90. . 133510.) (95. . 213050.) (100. . 323770.) (110. .
665260.) (120. . 1213000.) (130. . 2025500.) (140. . 3168200.) (150.86 .
4898000.))))
  )
)

```

## APPENDICE D: Definizione delle UDF

```
#include "udf.h"
#include <math.h>

DEFINE_DPM_PROPERTY(my_psat, c, t, tp, T)
{
    real psat;
    real cost = 216.592;
    real z1 = -14.740846;
    real z2 = 2.4327015;
    real z3 = -5.3061778;
    real term;

    /* Calcolo del termine nell'esponente */
    term = z1 * (1.0 - T/cost) +
        z2 * pow((1.0 - T/cost), 1.9) +
        z3 * pow((1.0 - T/cost), 2.9) * (cost/T);

    /* Pressione di saturazione in Pascal */
    psat = 0.518e6 * exp(term);

    return psat;
}

#include "udf.h"
#include <math.h>

real erf_approx(real x)
{
    real a1, a2, a3, a4, a5, p;
    real t, y;
    int sign;

    a1 = 0.254829592;
    a2 = -0.284496736;
    a3 = 1.421413741;
    a4 = -1.453152027;
    a5 = 1.061405429;
    p = 0.3275911;

    sign = 1;
    if (x < 0)
        sign = -1;
```

```

x = fabs(x);

t = 1.0 / (1.0 + p*x);
y = 1.0 - (((((a5*t + a4)*t) + a3)*t + a2)*t + a1)*t*exp(-x*x);

return sign * y;
}

DEFINE_SPECIFIC_HEAT(my_user_cp, T, Tref, h, yi)
{
    real cp;
    real T_local, integral_h;
    real tau1, tau2, tau3, tau4;
    real tau1_ref, tau2_ref, tau3_ref, tau4_ref;
    real tau1_273, tau2_273, tau3_273, tau4_273;
    real a1, a2, a3, a4;
    real b1, b2, b3, b4;
    real c1, c2, c3, c4;
    real sqrt_pi_2;
    real H_273, H_374;

    /* Costanti */
    T_local = T;
    a1 = 0.06409;  a2 = 0.103;  a3 = 1.896;  a4 = 0.2505;
    b1 = 318.9;    b2 = 324.5;  b3 = 329.1;  b4 = 334.4;
    c1 = 5.577;    c2 = 12.75;  c3 = 375.8;  c4 = 32.15;
    sqrt_pi_2 = 0.886226925;

    /* Calcolo H_273 rispetto a Tref = 298 K */
    /* H_273 = integrale da 298 a 273 (negativo perché andiamo indietro) */
    /* Entrambe 273 e 298 sono nel Range 2 */

    tau1_ref = (298.0 - b1) / c1; /* tau a Tref = 298 */
    tau2_ref = (298.0 - b2) / c2;
    tau3_ref = (298.0 - b3) / c3;
    tau4_ref = (298.0 - b4) / c4;

    tau1_273 = (273.0 - b1) / c1; /* tau a 273 */
    tau2_273 = (273.0 - b2) / c2;
    tau3_273 = (273.0 - b3) / c3;
    tau4_273 = (273.0 - b4) / c4;

    /* H_273 = integrale da 298 a 273 = - integrale da 273 a 298 */
    H_273 = -1000.0 * (
        a1 * c1 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau1_ref) - erf_approx(tau1_273)) +
        a2 * c2 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau2_ref) - erf_approx(tau2_273)) +

```

```

a3 * c3 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau3_ref) - erf_approx(tau3_273)) +
a4 * c4 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau4_ref) - erf_approx(tau4_273))
);

/* Calcolo H_374 rispetto a Tref = 298 K */
/* H_374 = H_273 + integrale da 273 a 374 */
tau1 = (374.0 - b1) / c1;
tau2 = (374.0 - b2) / c2;
tau3 = (374.0 - b3) / c3;
tau4 = (374.0 - b4) / c4;

H_374 = H_273 + 1000.0 * (
a1 * c1 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau1) - erf_approx(tau1_273)) +
a2 * c2 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau2) - erf_approx(tau2_273)) +
a3 * c3 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau3) - erf_approx(tau3_273)) +
a4 * c4 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau4) - erf_approx(tau4_273))
);

/* Calcolo cp e entalpia in base al range di T_local */
/* I RANGE RIMANGONO INVARIATI: < 273, 273-374, > 374 */

if (T_local < 273.0)
{
/* Range 1: T < 273 */
cp = 1231.28 + 2.31042 * T_local;
/* H = H_273 + integrale da 273 a T_local (negativo se T_local < 273) */
integral_h = H_273 + 1231.28 * (T_local - 273.0) +
0.5 * 2.31042 * (T_local*T_local - 273.0*273.0);
}
else if (T_local >= 273.0 && T_local <= 374.0)
{
/* Range 2: 273 <= T <= 374 */
tau1 = (T_local - b1) / c1;
tau2 = (T_local - b2) / c2;
tau3 = (T_local - b3) / c3;
tau4 = (T_local - b4) / c4;

cp = 1000.0 * (a1 * exp(-tau1*tau1) +
a2 * exp(-tau2*tau2) +
a3 * exp(-tau3*tau3) +
a4 * exp(-tau4*tau4));

/* Se T_local è tra 273 e 298 */
if (T_local <= 298.0)
{
/* H = H_273 + integrale da 273 a T_local */

```

```

integral_h = H_273 + 1000.0 * (
    a1 * c1 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau1) - erf_approx(tau1_273)) +
    a2 * c2 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau2) - erf_approx(tau2_273)) +
    a3 * c3 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau3) - erf_approx(tau3_273)) +
    a4 * c4 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau4) - erf_approx(tau4_273))
);
}
else /* T_local > 298 */
{
    /* H = integrale da 298 a T_local (positivo) */
    integral_h = 1000.0 * (
        a1 * c1 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau1) - erf_approx(tau1_ref)) +
        a2 * c2 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau2) - erf_approx(tau2_ref)) +
        a3 * c3 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau3) - erf_approx(tau3_ref)) +
        a4 * c4 * sqrt_pi_2 * (erf_approx(tau4) - erf_approx(tau4_ref))
    );
}
}
else /* T_local > 374 */
{
    /* Range 3: T > 374 */
    cp = 2822.48 - 2.83834 * T_local;

    /* H = H_374 + integrale da 374 a T_local */
    integral_h = H_374 + 2822.48 * (T_local - 374.0) -
        0.5 * 2.83834 * (T_local*T_local - 374.0*374.0);
}

*h = integral_h;
return cp;
}

```

## APPENDICE E: Codice per il confronto ai MP

```
clear all
close all
clc

%% Elaborazione dati
% Definizione del numero dei sensori e creazione vettori per plots
N_c_sensors=38; % numero di sensori di concentrazione
N_v_sensors=9; % numero di sensori di velocità
vec_c_sensors=[1:1:N_c_sensors]; % vettore sensori concentrazione
vec_v_sensors=[1:1:N_v_sensors]; % vettore sensori velocità

T = readtable('mol_MP_flacs.xlsx');

% Estraggo la seconda colonna (i valori massimi)
MaxExp = T{:,2}; % vettore 38x1 con i massimi dei sensori

% Controllo che il numero di righe corrisponda al numero di sensori
if length(MaxExp) ~= N_c_sensors
    error('Sono attesi %d sensori ma il file Excel ne contiene %d.', ...
        N_c_sensors, length(MaxExp));
end

%% Importazione dati CFD 100% metano concentrazione
% Lettura file con dati concentrazione CFD
CFDc=importdata('co2_pos1_results.txt');

nv=9; % n punti acquisiti per sensore
```

```

% Calcolo valor medio conc. per ogni sensore

for i=1:N_c_sensors

    ConcCFD(i)=mean(CFDc.data(nv*(i-1)+1:nv*i,end));

end

%% Concentrations plots

f1=figure(1)
f1=figure('Position', get(0, 'Screensize'));
plot(vec_c_sensors,ConcCFD,'bs','markersize',7,'linewidth',1.5,'MarkerFaceColor','b');
hold on

% >>> Aggiungo i punti dei massimi da Excel sullo stesso grafico <<<
plot(vec_c_sensors, MaxExp, 'o', ...

    'MarkerEdgeColor', 'r', ...

    'MarkerFaceColor', 'r', ...

    'LineWidth', 1.5, ...

    'MarkerSize', 7);

yline(0.04, 'r--');

grid on

xlabel('Concentration sensors','FontSize',15);
ylabel('CO_2 concentration [-]','FontSize',15);

% xlim([0 39]);

% saveas(f1,'Concentration_points.png','png');

f2=figure('Position', get(0, 'Screensize'));
b=bar(vec_c_sensors,ConcCFD);
b.FaceColor=[0 0 1];

%b(2).FaceColor=[1 0 0];

hold on

```

```
% >>> Aggiungo i punti dei massimi da Excel sullo stesso grafico <<<
```

```
plot(vec_c_sensors, MaxExp, 'o', ...
```

```
    'MarkerEdgeColor', 'r', ...
```

```
    'MarkerFaceColor', 'r', ...
```

```
    'LineWidth', 1.5, ...
```

```
    'MarkerSize', 7);
```

```
grid on
```

```
xticks([vec_c_sensors]);
```

```
xlabel('Concentration sensors','FontSize',15);
```

```
ylabel('CO_2 concentration ','FontSize',15);
```

```
legend('Ansys Fluent','FLACS','Location','best','FontSize',12);
```





## RINGRAZIAMENTI

Desidero ringraziare il mio relatore, il Prof. Andrea Carpignano, per la fiducia riposta in me e per il continuo supporto durante lo sviluppo di questo lavoro.

Un ringraziamento speciale va ad Emanuela Bruno e alla Prof.ssa Raffaella Gerboni, che mi hanno accompagnato con grande disponibilità e attenzione durante tutto il percorso di tesi. La loro presenza costante, la professionalità e la capacità di trasmettere entusiasmo hanno reso questa esperienza non solo formativa, ma anche profondamente significativa dal punto di vista umano.

Desidero inoltre ringraziare l'azienda RAMS&E per avermi dato l'opportunità di svolgere il tirocinio e per avermi coinvolto nelle attività che hanno portato alla realizzazione di questo lavoro. In particolare, ringrazio Valentina Furfaro e Luca Portè per il supporto, la disponibilità e l'aiuto concreto all'interno del team.