



Emissione e dispersione di sostanze pericolose

Davide Manca

Dipartimento di Chimica Materiali e Ingegneria Chimica
Politecnico di Milano – ITALY

Il termine **dispersione** è da preferirsi al termine rilascio.

Una **emissione** di sostanza **liquida** o **gassosa** nell'ambiente è in generale seguita da una **dispersione** della nube di gas (vapore) formatasi.

La **dispersione** è quindi l'**effetto** della **emissione** che ne è la **causa**.

Possibili emissioni:

- depressurizzazione di un serbatoio
- cedimento di una valvola di rottura
- svuotamento o cedimento strutturale di un serbatoio
- fessurazione di una tubatura/condotto
- sversamento da fusto/contenitore/serbatoio/...



L'emissione può essere liquida e/o gassosa. Se puramente liquida è richiesto un passaggio di stato alla fase gassosa (quantomeno spray) affinché si abbia dispersione in atmosfera.

Notazione estesa vettoriale delle equazioni indefinite di bilancio di materia, specie, quantità di moto ed energia.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0$$

$$\frac{D(\rho \omega_i)}{Dt} = -\nabla(\mathbf{j}_i) + \dot{w}_i$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla P - \nabla \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g}$$

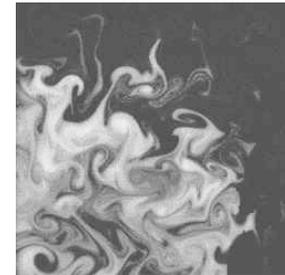
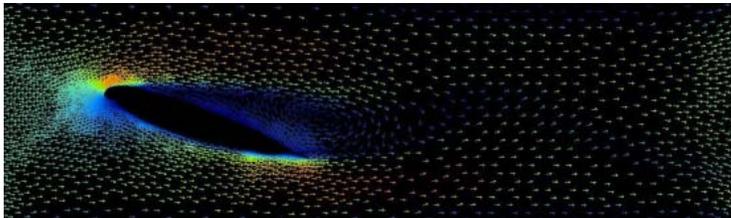
$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \left(u + \frac{1}{2} v^2 + \phi \right) = - \left[\nabla \times \rho \mathbf{v} \left(u + \frac{1}{2} v^2 + \phi \right) \right] - (\nabla \times \mathbf{q}) + \rho (\mathbf{v} \times \mathbf{g}) - (\nabla \times P \mathbf{v}) - \left[\nabla \times (\boldsymbol{\tau} \times \mathbf{v}) \right]$$



Claude Louis Marie Henri Navier
1785-1836



George Gabriel Stokes
1819-1903



The End ???

Storicamente, lo studio sulla dispersione nasce per predire gli effetti della **emissione di sostanze inquinanti da camino**.

Segue, temporalmente, l'analisi della dispersione di **sostanze pericolose emesse accidentalmente** da attività industriali.

Nell'ambito delle condizioni caratterizzanti una dispersione, Lees 1996, propone:

Classificazione del fluido e della sorgente

- **Spinta di galleggiamento**
 - Spinta neutra →
 - Spinta positiva ↑
 - Spinta negativa ↓
- **Quantità di moto**
 - Ridotta quantità di moto
 - Elevata quantità di moto



Classificazione del fluido e della sorgente

▪ Geometria della sorgente

- Sorgente puntuale
- Sorgente lineare
- Sorgente superficiale



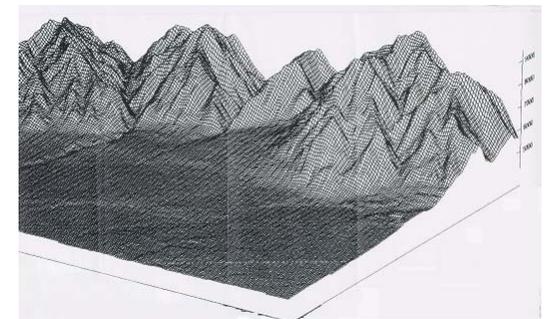
▪ Durata della sorgente

- Istantanea
- Continua
- Durata intermedia



▪ Quota della sorgente

- Da terra
- Elevata



La dispersione è funzione anche delle condizioni meteorologiche e topografiche della zona. Lees, 1996, propone la seguente classificazione:

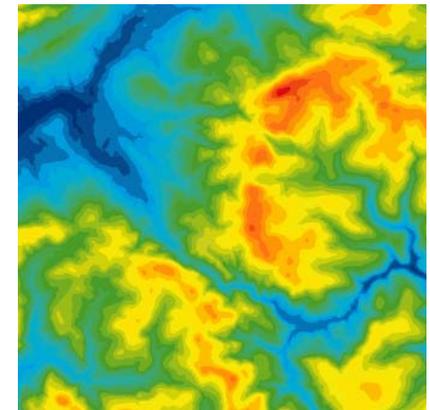
Meteorologia

- Vento
- Stabilità



Topografia

- Rugosità della superficie
- Influenza degli edifici e degli ostacoli
- Aree urbane
- Aree costiere o marittime
- Terreni aventi profilo e caratteristiche articolate



Spinta di galleggiamento

Come detto in precedenza i gas possono avere **spinta** di galleggiamento **neutra, positiva o negativa**.

La spinta di galleggiamento dipende dalla differenza tra la **densità dell'aria ambiente**, ρ_a , e quella del gas emesso, ρ_g .

Considerando i **gas ideali**, data la bassa pressione e la temperatura in genere elevata, si ha:

$$PV = nRT \quad \Rightarrow \quad \tilde{V} = \frac{RT}{P} \quad \Rightarrow \quad \tilde{\rho} = \frac{P}{RT} \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{P \, PM}{RT} \quad \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$$

Dato che la pressione ambiente è costante (pressione atmosferica) la densità del gas e quindi il galleggiamento dello stesso dipendono dal **peso molecolare**, PM , del gas e dalla sua **temperatura**, T .

Mentre in assenza di reazione il peso molecolare del gas è costante nel tempo, non altrettanto lo è la temperatura del gas che potrà variare a causa della diluizione con l'aria circostante o a causa di fenomeni di evaporazione o condensazione originati dal rilascio.

Spinta di galleggiamento

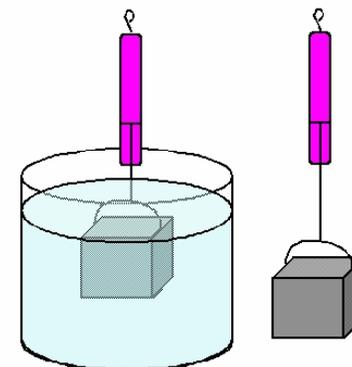
Come si vedrà nel prosieguo si possono avere gas aventi spinta negativa (cosiddetti **gas densi**) caratterizzati da un peso molecolare anche decisamente inferiore rispetto a quello dell'aria.

Se $PM_g < PM_a$ ma il gas è denso, vuol dire che al momento del rilascio la sua temperatura è inferiore (spesso decisamente inferiore) rispetto a quella dell'aria ambiente.

Al contrario possono aversi gas con peso molecolare superiore a quello dell'aria ma contraddistinti da una spinta di galleggiamento positiva. Ciò dipende dalla temperatura di emissione del gas che deve essere in questo caso superiore a quella dell'aria.

Con il trascorrere del tempo il trascinamento di una corrente di aria all'interno della nube di gas contribuisce alla diluizione del gas originario. Ciò conduce ad una equalizzazione della temperatura e ad una riduzione della differenza di peso molecolare, e quindi di densità, esistente tra i due gas (ρ_g e ρ_a). Spesso un gas denso può diventare leggero a causa dell'innalzamento della T .

Con il termine **dispersione passiva** si intende quella riferita a gas aventi spinta di galleggiamento neutra.



Il rilascio continuo di sostanza avente una **energia cinetica ridotta** forma un **pennacchio** che tende a fluttuare, ondeggiare, gonfiarsi.

Al contrario se l'**energia cinetica** è **elevata** si ha la formazione di un **getto** avente forma ben definita.

La **quantità di moto** della sostanza rilasciata gioca un ruolo fondamentale nell'ammontare di **aria trascinata** ed inglobata nella nube di gas che va formandosi.

Maggiore la quantità di moto, maggiore la quantità di aria ambiente trascinata.

La frazione di aria trascinata modifica la densità della nube emessa ed è quindi importante per la successiva dispersione in atmosfera.

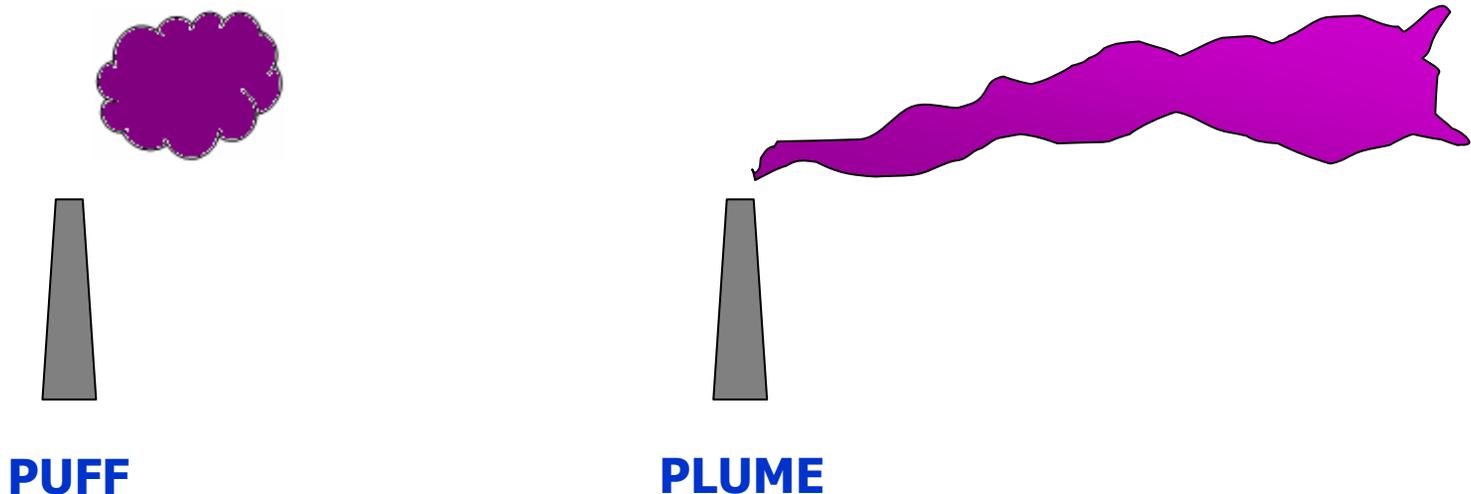


L'emissione di sostanza dal **foro** in una tubazione è assimilabile ad una sorgente **puntiforme**.

L'emissione di sostanza da una **pozza** è assimilabile ad una sorgente **superficiale**.

Gli scenari più frequentemente descritti e modellati sono:

- **rilascio istantaneo** da una **sorgente puntiforme** → **puff** (sbuffo)
- **rilascio continuo** da una **sorgente puntiforme** → **plume** (pennacchio)



A livello meteorologico, il vento e la stabilità atmosferica sono i due aspetti che condizionano maggiormente la dispersione di un gas.

Il **vento** viene descritto e quantificato tramite gli attributi: **velocità, direzione, persistenza e turbolenza.**

In meteorologia si parla di condizioni:

- **Stabili**
- **Instabili**
- **Neutre**

La **dispersione** è **massima** per condizioni **instabili.**

La **dispersione** è **minima** per condizioni **stabili.**



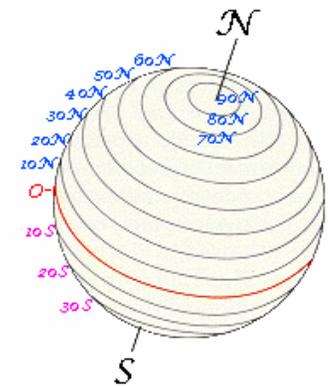
La dispersione di gas dipende principalmente dalla meteorologia:

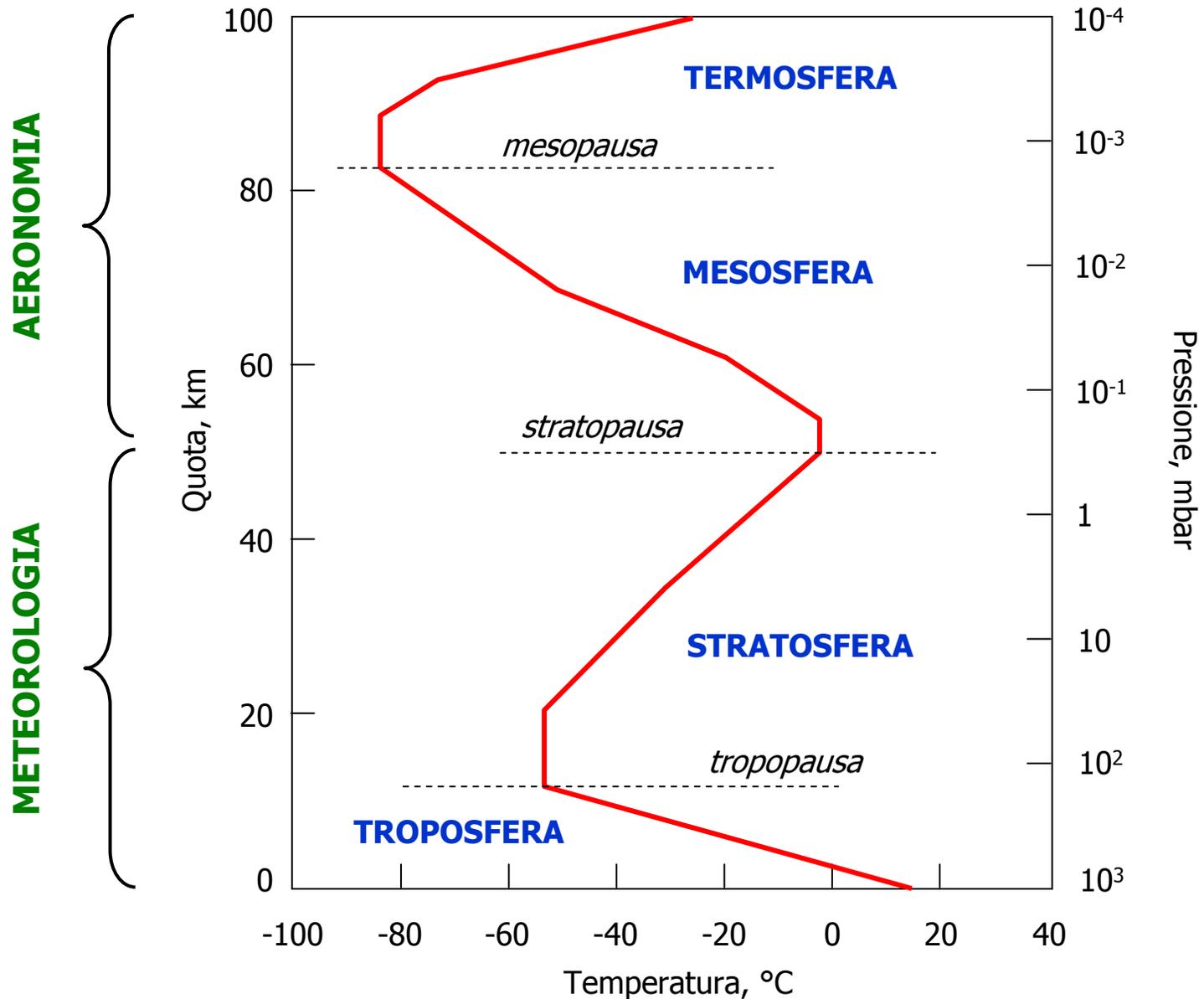
- Vento
- Stabilità atmosferica
- Umidità
- Irraggiamento solare
- Temperatura dell'ambiente circostante (non solo dell'aria)
- Copertura nuvolosa



Altri aspetti sono:

- Latitudine
- Mese dell'anno
- Ora del giorno
- Tipologia, rugosità del terreno e topografia del territorio

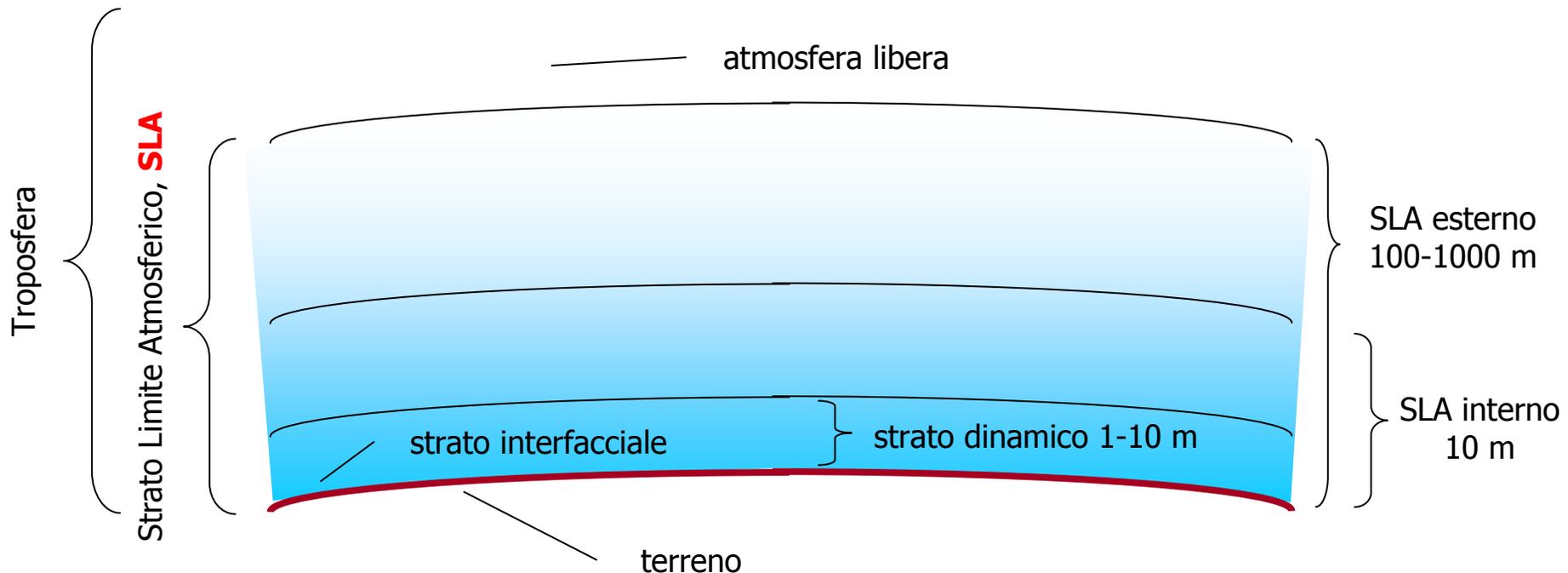




Nell'ambito della meteorologia, la **turbolenza atmosferica** condiziona pesantemente la dispersione di sostanze pericolose.

Per studiare la turbolenza atmosferica occorre focalizzare l'attenzione sul cosiddetto **strato limite atmosferico** (*atmospheric boundary layer*), detto anche **strato limite planetario**.

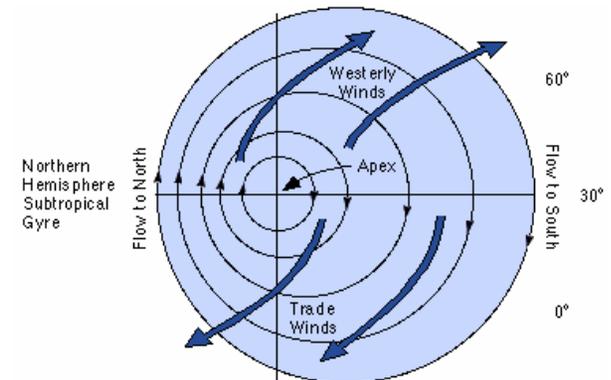
Qualora le condizioni meteo siano **instabili** si parla di **strato limite convettivo**.



La **troposfera** ha un'altezza media di 10 km. All'equatore è alta circa 18 km mentre ai poli 8 km. Nella troposfera la temperatura dell'aria diminuisce con la quota fino alla tropopausa dove si hanno in media -56°C .

I primi 1000 metri della **troposfera** vengono individuati con il termine: **strato limite atmosferico** (o **planetario**). In questo strato la superficie terrestre esercita il proprio ruolo sul flusso delle correnti aeree. La velocità del vento e la sua direzione sono cioè condizionati dal gradiente di pressione, dalla forza di Coriolis e dagli sforzi tangenziali con il terreno.

Sopra lo strato limite atmosferico si ha lo **strato geostrofico** dove il flusso delle correnti è funzione soltanto del gradiente di pressione e della forza di Coriolis.



The geostrophic wind is defined as the wind resulting from the balance between the Coriolis force and the pressure gradient force. Frictional effects are neglected, which is usually a very good approximation for the synoptic scale instantaneous flow in the midlatitude mid-troposphere.

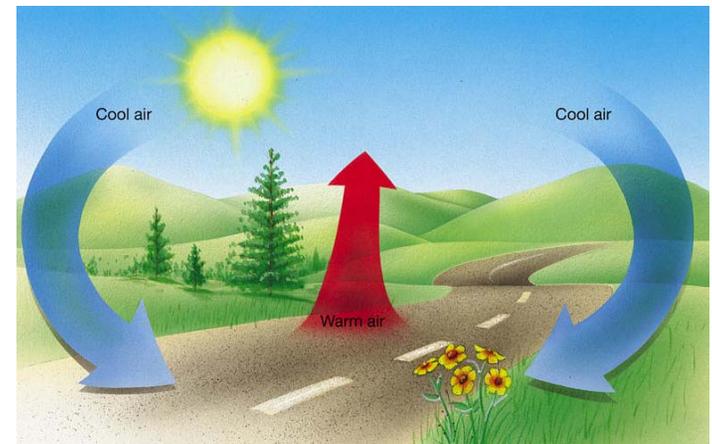
Tratto da Wikipedia (<http://en.wikipedia.org>)

Nel caso di condizioni di **neutralità** della stabilità, le spinte di galleggiamento atmosferiche sono trascurabili.

Qualora la **stabilità** sia **neutra**, l'energia turbolenta deriva sia dall'attrito del vento originato dalla superficie terrestre che dal cambiamento di direzione in funzione della quota.

Nel caso di condizioni di **instabilità** ai precedenti termini si aggiungono le **spinte di galleggiamento** dovute principalmente ai **moti convettivi** originati dai flussi di calore sensibile ceduti dal terreno all'aria che lambisce la superficie.

Le condizioni di **stabilità** atmosferica in generale capitano di **notte**. In questo caso il terreno è freddo e lo strato superficiale di aria è più freddo di quello soprastante. In questo caso i **moti convettivi** hanno **verso opposto** rispetto a quelli ascensionali tipici delle condizioni di instabilità.

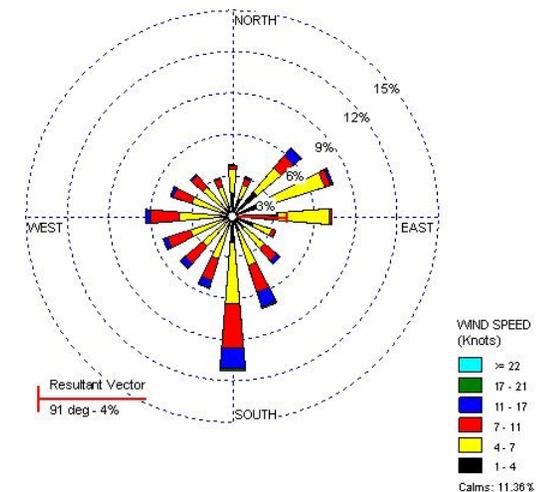


La **direzione** e la **velocità** del vento a livello superficiale (usualmente misurato a 3 o 10 m) ed in quota, unitamente alla **persistenza** permettono di disegnare la **rosa dei venti**.

In generale la rosa dei venti è suddivisa in 16 settori (22.5° cad).

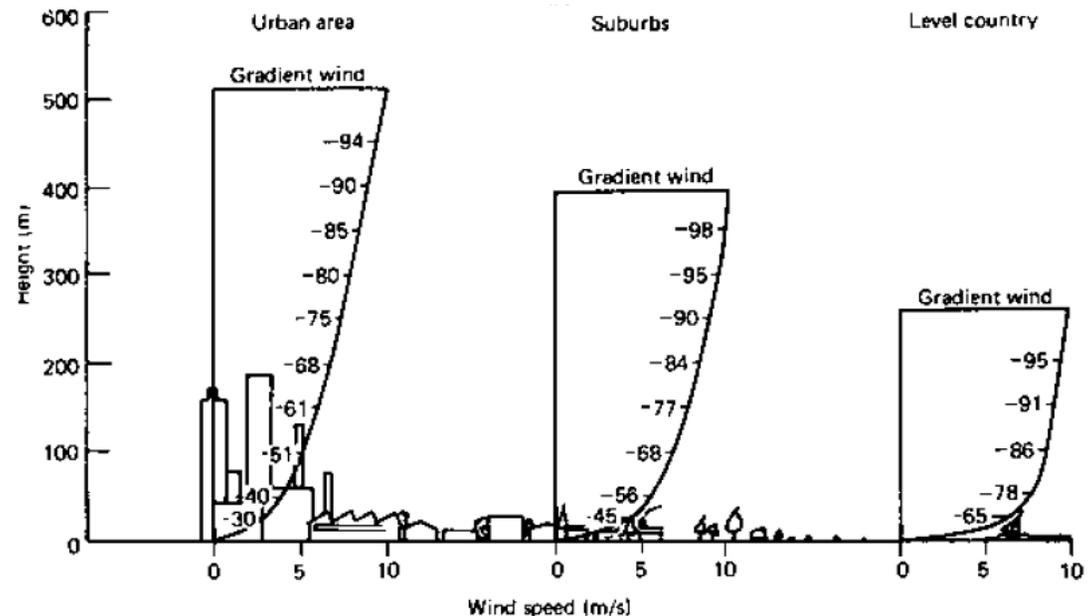
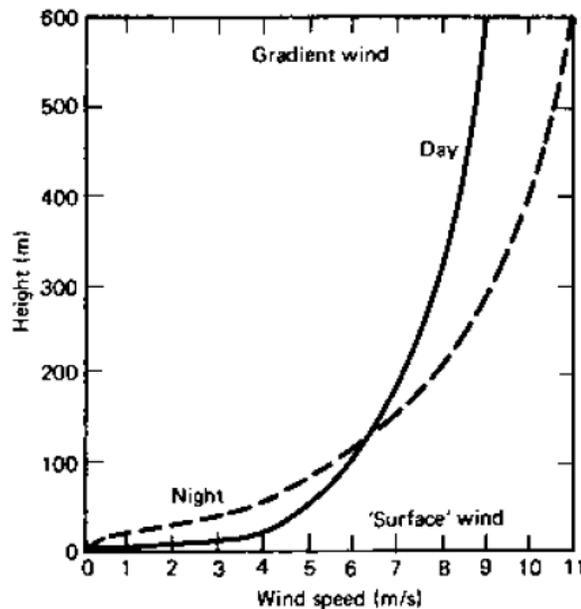
La **persistenza** viene definita come il numero di volte in cui il vento soffia in una determinata direzione (settore della rosa dei venti) per un determinato numero di ore nell'ambito di un periodo di riferimento (in generale un anno).

La **turbolenza** del vento misura il numero e la consistenza delle fluttuazioni nell'unità di tempo. I fattori che maggiormente condizionano la turbolenza ventosa sono il gradiente di velocità del vento e la rugosità del terreno.



La **velocità del vento** varia con la **quota** essendo nulla a contatto con la superficie terrestre (ipotesi di assenza di slittamento). Il profilo di velocità dipende anche dalla **rugosità superficiale** e dal **periodo della giornata**.

In genere, nell'emisfero boreale (nord) il vento cambia direzione ruotando in senso orario. Nell'emisfero australe (sud) il vento ruota in senso antiorario.



Tratto da Lees, 1996

Un altro aspetto che condiziona significativamente la dispersione gassosa è la **rugosità** del terreno.

In meteorologia **tutti i terreni** più o meno accidentati e più o meno costruiti sono **aerodinamicamente rugosi**.

Un terreno è **aerodinamicamente rugoso** quando il flusso a valle è **turbolento**.

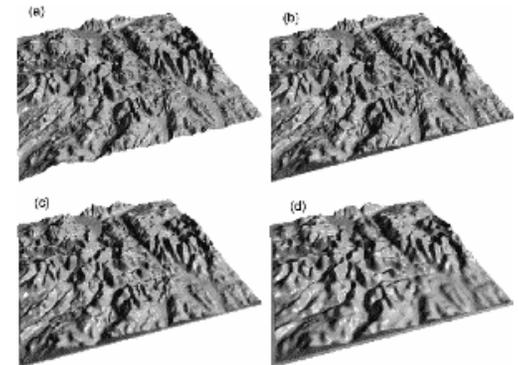
Su una superficie rugosa il flusso **non dipende** dalla **viscosità** del fluido ma solo dalla **lunghezza della rugosità**.

La lunghezza della rugosità dipende dalla altezza e dalla distanza degli elementi che generano la turbolenza.

Detta ε l'altezza media degli elementi rugosi e z_0 la lunghezza della rugosità si ha:

$$z_0 = \frac{\varepsilon}{k}$$

k è una costante che a seconda degli autori e della tipologia di terreno varia tra 7.35 e 30.



La climatologia terrestre è quasi completamente regolata dall'**assorbimento** ed **emissione** di **energia radiativa** da parte della terra e dell'atmosfera.

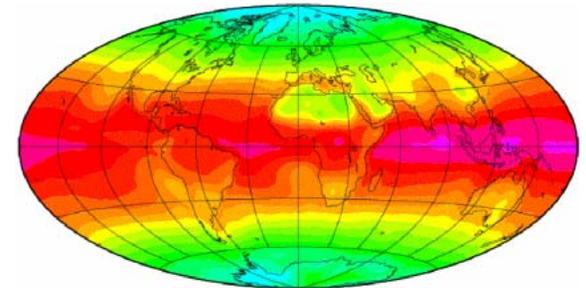
La temperatura media terrestre è costante su tempi medio lunghi. Ciò sta a significare che complessivamente la terra e l'atmosfera cedono per irraggiamento tanta energia quanto quella assorbita dal sole.

L'atmosfera gioca un ruolo fondamentale nel bilancio radiativo complessivo. Essa regola sia la frazione di energia radiante, che effettivamente giunge a terra, sia quella ceduta allo spazio.

L'atmosfera non è completamente **trasparente**: i gas otticamente attivi presenti in atmosfera, O_2 , O_3 , H_2O e CO_2 , sono in grado di assorbire ed emettere energia radiativa.

L'atmosfera terrestre è caratterizzata da una finestra di trasparenza per la radiazione elettromagnetica nell'intervallo 300-800 nm.

Si noti che circa il 40% dell'energia emessa dal sole è concentrata nella regione 400-700 nm.



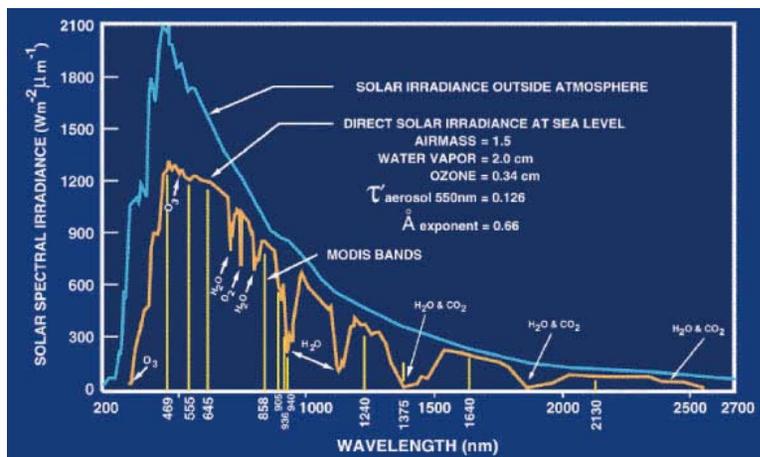
Irraggiamento solare

Il flusso di energia solare integrato lungo tutto lo spettro elettromagnetico che passa attraverso una superficie ortogonale alla radiazione e posta nel vuoto lungo la traiettoria terrestre è pari a 1370 W/m^2 .

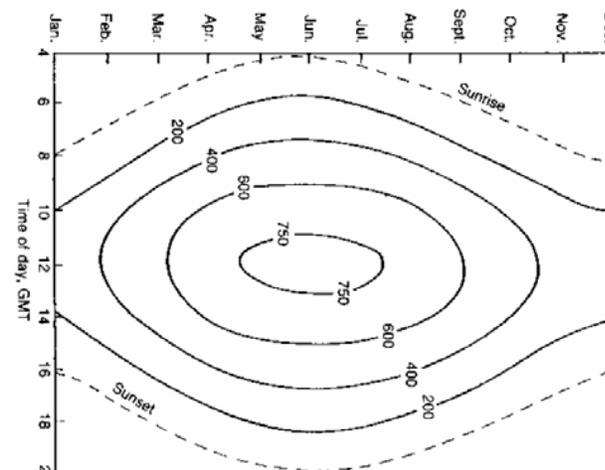
Una frazione dell'energia irraggiata dal sole che arriva sulla terra viene direttamente riflessa verso lo spazio. Si parla di **albedo** planetario: $R_p = 0.3$.

La superficie terrestre irraggia un flusso superiore (390 W/m^2) a quello effettivamente ceduto allo spazio (240 W/m^2) in quanto le nubi, il vapor acqueo ed i gas serra assorbono e riemettono una frazione di tale energia.

Dato che la superficie terrestre è mediamente a temperatura superiore rispetto all'atmosfera, il flusso netto di energia radiativa va dalla terra all'atmosfera.



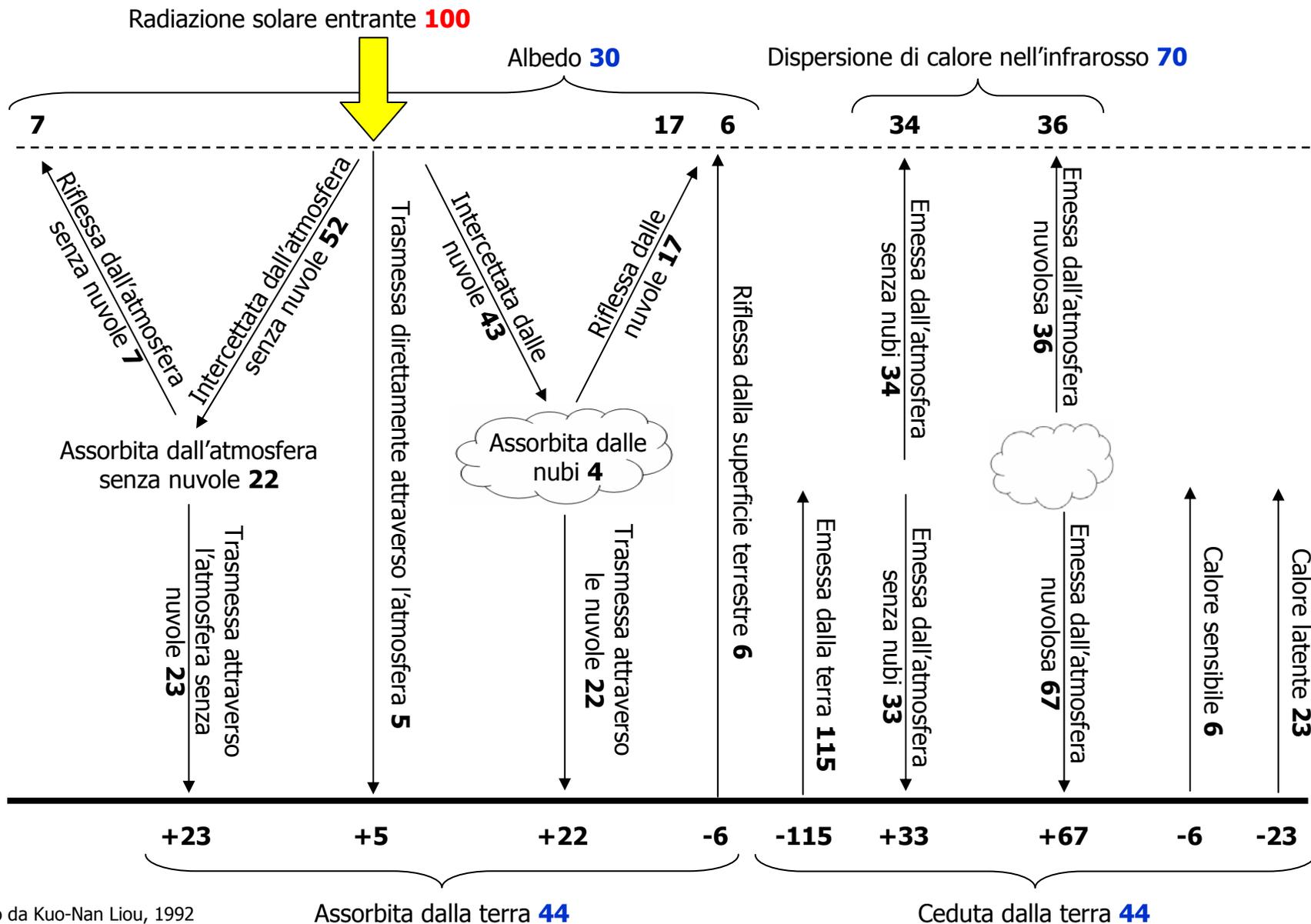
Radiazione solare fuori dell'atmosfera e a livello del mare. Tratto da Wikipedia



Radiazione solare a terra nei pressi di Cambridge, UK.

Tratto da Lees, 1996

Bilancio energetico terrestre



Tratto da Kuo-Nan Liou, 1992

Ruolo della temperatura

Il galleggiamento gioca un ruolo fondamentale a livello atmosferico nel mantenimento o nella riduzione dell'energia turbolenta.

Di notte lo strato limite atmosferico è stabilmente stratificato dato che il terreno è più freddo dell'aria soprastante.

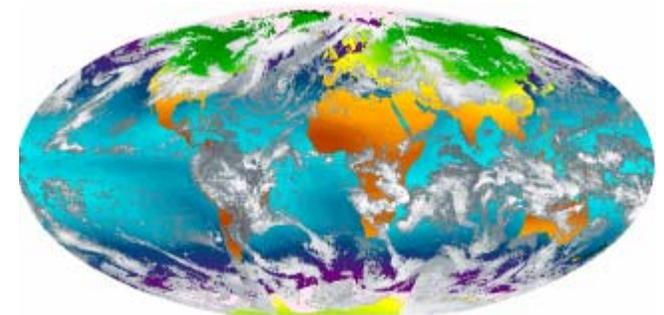
Quando il sole sorge con cielo limpido, la radiazione scalda più velocemente il terreno rispetto all'aria soprastante. Ciò conduce alla turbolenza dello strato immediatamente a contatto con il suolo.

L'aria calda salendo produce una miscelazione vigorosa dello strato limite convettivo. La turbolenza dello strato limite convettivo continua a crescere nel corso della giornata.

Nel tardo pomeriggio l'aria raggiunge la stessa temperatura del suolo. Si ha una condizione adiabatica con assenza di scambio di calore tra suolo ed aria.

Alla sera la temperatura dell'aria supera quella del suolo conducendo ad una stratificazione stabile.

Lo strato stabile cresce di spessore nel corso della notte. In genere, la velocità del vento di notte è molto bassa.



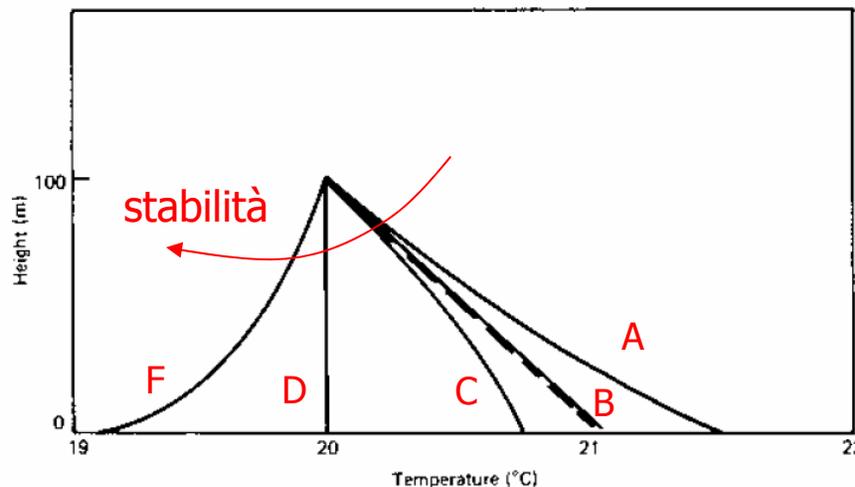
Una delle sorgenti di turbolenza è quella dovuta al gradiente verticale della temperatura atmosferica.

Un volumetto di aria che viene spinto verso l'alto incontra una pressione inferiore e quindi espandendosi si raffredda.

In condizioni **adiabatiche**, dette anche **neutre**, con aria secca il gradiente di temperatura è:

$$\frac{dT}{dz} = -0.01 \text{ } ^\circ\text{C/m}$$

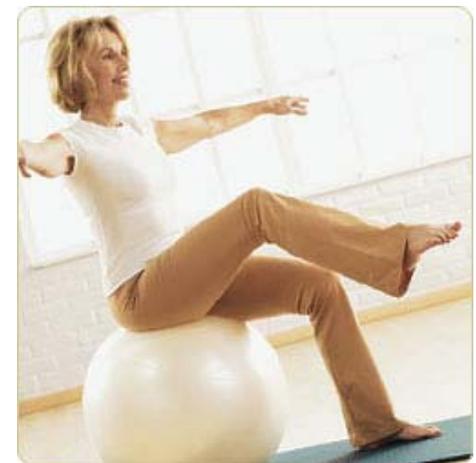
quindi in condizioni adiabatiche si ha una diminuzione di 1°C ogni 100 m.



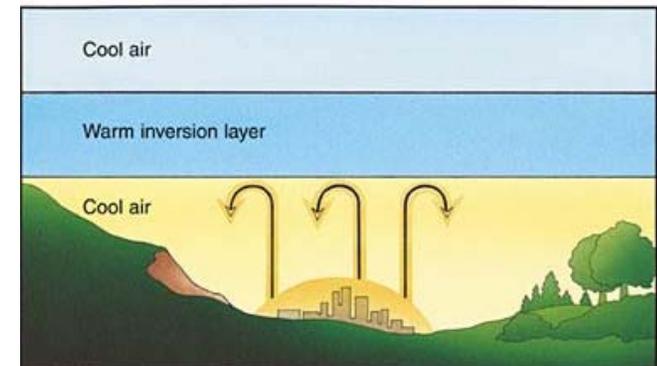
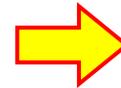
Tratto da Lees, 1996

- A** = instabile, superadiabatico
- B** = neutro, adiabatico
- C** = stabile, subadiabatico
- D** = più che stabile, isotermo
- F** = molto stabile, inversione

- A** Le condizioni **superadiabatiche**, $dT/dz < -0.01$ °C/m, sono date da un **forte irraggiamento** o dal **passaggio di aria fredda su un terreno caldo**. Ciò favorisce i **moti convettivi** e quindi l'**instabilità** atmosferica.
- B** il profilo $dT/dz = -0.01$ °C/m individua la condizione **adiabatica**. Si parla anche di condizione **neutra** che è associata a **cielo coperto**, nuvoloso e a **venti da moderati a forti**.
- C** il profilo $-0.01 < dT/dz < 0$ °C/m individua una condizione **subadiabatica** che favorisce la **stabilità**.
- D** il profilo $dT/dz = 0$ °C/m individua la condizione **isoterma** che favorisce significativamente la **stabilità**.
- F** il profilo $dT/dz > 0$ °C/m individua una condizione di **inversione** che impedisce ogni moto convettivo ascensionale ed è quindi la situazione **più favorevole** per la **stabilità** atmosferica.



Si ha in genere **inversione termica** di notte con cielo stellato e venti moderati. In questo caso il terreno dissipa calore per irraggiamento e lo strato di aria adiacente si raffredda maggiormente rispetto agli strati superiori. La **stratificazione** risultante impedisce ogni ulteriore mescolamento conducendo ad una stagnazione atmosferica.



Nel 1961 **Pasquill** propone le seguenti **classi di stabilità** meteorologica. Tali classi verranno successivamente utilizzate in modo esteso per classificare le condizioni meteo e con esse i **coefficienti di dispersione atmosferica** relativi ai **modelli gaussiani** (gas galleggianti). Esistono altresì modelli di dispersione di gas densi che si basano sulle classi di Pasquill.

Insolazione				Notte	
Velocità del vento a 10 m di quota [m/s]	Forte	Media	Debole	Nuvole $\geq 4/8$	Nuvole $\leq 3/8$
<2	A	A-B	B	-	-
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	E
5-6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Le classi di Pasquill spaziano tra **A** e **F**. Alcuni autori riportano anche una classe aggiuntiva **G** (raramente occorrente).

Altri autori ed enti di ricerca, adottando l'approccio di Pasquill, hanno proposto suddivisioni e catalogazioni in classi differenti ma concettualmente analoghe (vedi Brookhaven National Laboratory, Turner, Klug, Cramer, Tennessee Valley Authority). Un altro importante autore che ha lavorato diffusamente su questo argomento è **Gifford**, 1976.

È possibile individuare una relazione diretta tra classe di stabilità di Pasquill e gradiente di temperatura.

<i>Pasquill stability</i>	$\Delta T / \Delta z$ (°C/100 m)	<i>Ri</i>
A	$\Delta T / \Delta z < -1.9$	$Ri < -2.51$
B	$-1.9 \leq \Delta T / \Delta z < -1.7$	$-2.51 \leq Ri < -1.07$
C	$-1.7 \leq \Delta T / \Delta z < -1.5$	$-1.07 \leq Ri < -0.275$
D	$-1.5 \leq \Delta T / \Delta z < -0.5$	$-0.275 \leq Ri < 0.089$
E	$-0.5 \leq \Delta T / \Delta z < 1.5$	$0.089 \leq Ri < 0.128$
F	$1.5 \leq \Delta T / \Delta z < 4.0$	$0.128 \leq Ri < 0.134$
G	$\Delta T / \Delta z \geq 4.0$	$Ri \geq 0.134$

Tratto da Lees, 1996

Ri è il numero adimensionale di **Richardson** che misura il rapporto tra la spinta di galleggiamento e lo sforzo turbolento.

Pasquill, 1961, propone anche una relazione tra classe di stabilità ed ampiezza del pennacchio in funzione della distanza dalla sorgente.

<i>Pasquill stability category</i>	<i>Lateral spread θ (deg)</i>	
	<i>d = 0.1 km</i>	<i>d = 100 km</i>
A	60	(20)
B	45	(20)
C	30	10
D	20	10
E	(15)	(5)
F	(10)	(5)

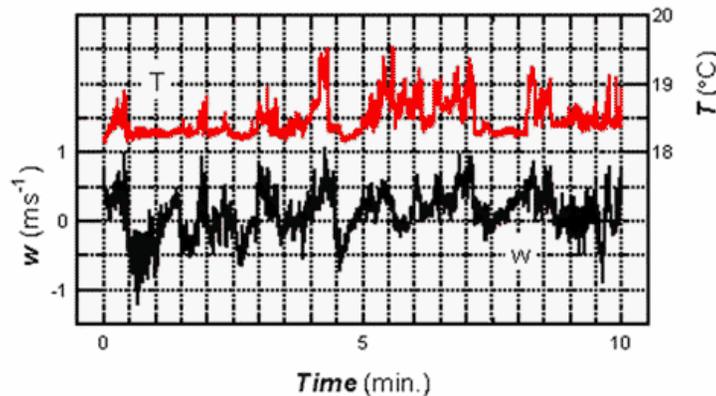
Tratto da Lees, 1996

Il vento ha tipicamente un comportamento dinamico. Si parla quindi di fluttuazioni della velocità del vento sia in termine di direzione (dispersione) che di velocità.

Per quanto riguarda la **direzione** le fluttuazioni vengono così quantificate:

- σ_{θ} , deviazione standard della direzione orizzontale del vento
- σ_{ϕ} , deviazione standard della inclinazione del vento rispetto al piano orizzontale.

Esistono delle correlazioni matematiche tra σ_{θ} , σ_{ϕ} e le classi meteorologiche di Pasquill. Tali equazioni sono usate nel modello di Pasquill per la dispersione passiva di gas.



Il vettore velocità del vento viene tipicamente individuato tramite le **tre componenti**:

- u = componente nella direzione principale, **longitudinale**, del vento
- v = componente nella direzione ortogonale, **trasversale**, del vento
- w = componente del vento in direzione **verticale** rispetto al terreno

È possibile introdurre i **valori medi** e le **fluttuazioni** come contributi distinti:

$$u = \bar{u} + u' \quad v = \bar{v} + v' \quad w = \bar{w} + w'$$

Anche in questo caso è possibile parlare di **deviazione standard** dei termini di fluttuazione:

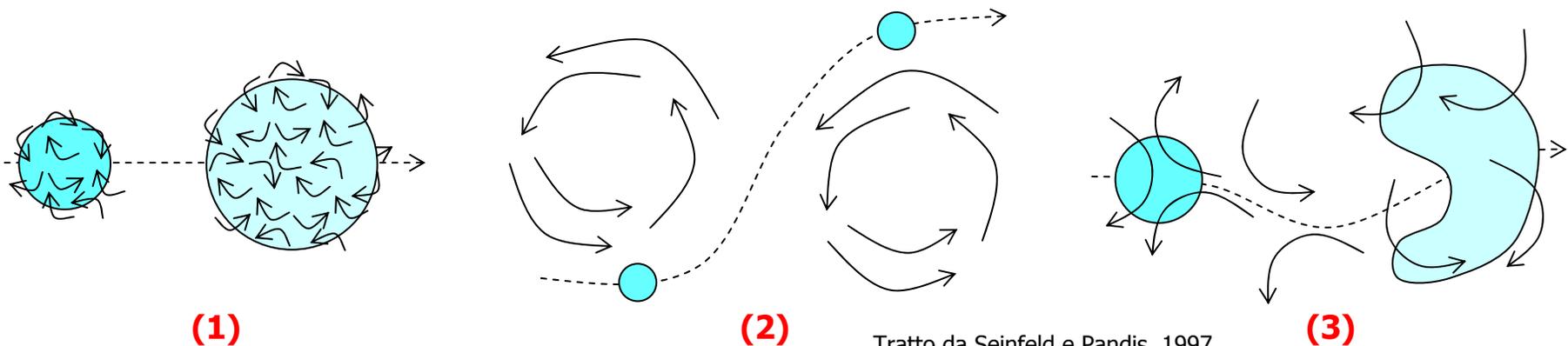
$$\sigma_u = \left(\overline{u'^2}\right)^{1/2} \quad \sigma_v = \left(\overline{v'^2}\right)^{1/2} \quad \sigma_w = \left(\overline{w'^2}\right)^{1/2}$$

Si parla anche di **intensità della turbolenza** in direzione trasversale, y , e verticale, z :

$$i_y = \left(\overline{v'^2}\right) / \bar{u} \quad i_z = \left(\overline{w'^2}\right) / \bar{u} \quad \rightarrow \quad i_y = \sigma_v / \bar{u} \quad i_z = \sigma_w / \bar{u}$$

Descrivendo qualitativamente il ruolo della turbolenza nella dispersione atmosferica di un composto occorre confrontare la dimensione della nube (per semplicità parleremo di rilascio istantaneo, puff) rispetto alla dimensione del vortice turbolento.

1. Se il puff è più grande dei vortici turbolenti allora essi contribuiscono a trascinare aria all'interno del puff facendolo gonfiare con conseguente diluizione della specie trasportata.
2. Se il puff è più piccolo dei vortici questi non lo diluiscono ma lo spostano spazialmente deformandolo.
3. Se il puff ha dimensione confrontabile con i vortici si ha una sovrapposizione dei fenomeni descritti in precedenza, (1) + (2).

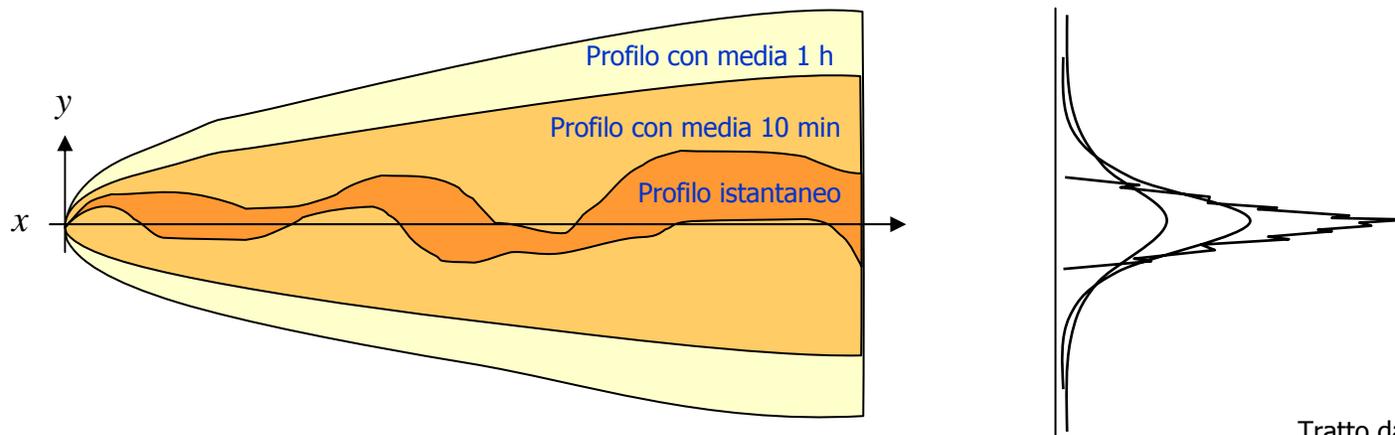


Tratto da Seinfeld e Pandis, 1997

La dimensione del pennacchio perpendicolare all'asse originato dalla direzione del vento è definita in termini di deviazione standard della distribuzione di concentrazione in quanto, in generale, la distribuzione di concentrazione è approssimabile con una Gaussiana.

In realtà se si fotografa istantaneamente il pennacchio è possibile evidenziare un andamento più articolato e serpeggiante con il moto del vento.

Se il tempo di osservazione si accresce, l'approssimazione Gaussiana diviene sempre più affidabile. Inoltre la deviazione standard del profilo di concentrazione trasversale cresce con il tempo di osservazione.



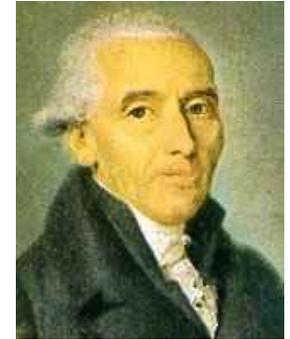
Tratto da Seinfeld e Pandis, 1997

La descrizione quantitativa della dispersione di inquinanti in atmosfera viene anche definita con i seguenti termini:

- Diffusione turbolenta;
- Diffusione atmosferica;
- Dispersione turbolenta.



Leonhard Euler
(1707-1783)



Joseph Lagrange
(1736-1813)

Esistono due approcci per la modellazione della dispersione turbolenta:

- approccio **Euleriano**;
- approccio **Lagrangiano**.

Un **modello Euleriano** descrive la concentrazione delle specie rispetto ad un volumetto di controllo inserito in un sistema di coordinate fisso.

Un **modello Lagrangiano** descrive i cambiamenti di concentrazione rispetto al fluido in movimento. Il modello si basa sulla descrizione della traiettoria di particelle di fluido. Dato che la diffusione turbolenta è caratterizzata da velocità puntuali random, si introduce il concetto di probabilità di trovare la particella di fluido in uno specifico volumetto (*pdf*: **p**robability **d**ensity **f**unction).

Focalizzando l'attenzione sull'**approccio Euleriano**, una delle possibili catalogazioni dei modelli di dispersione è la seguente, Lees 1996:

- Modelli basati sull'**equazione di convezione-diffusione** (detti anche modelli *K*)
- Modelli **statistici**
- Modelli di **somiglianza** (similarity)
- Modelli a scatola (**box**), a lastra (**slab**), a bombetta (**top-hat**)



Similarity



Box



Slab



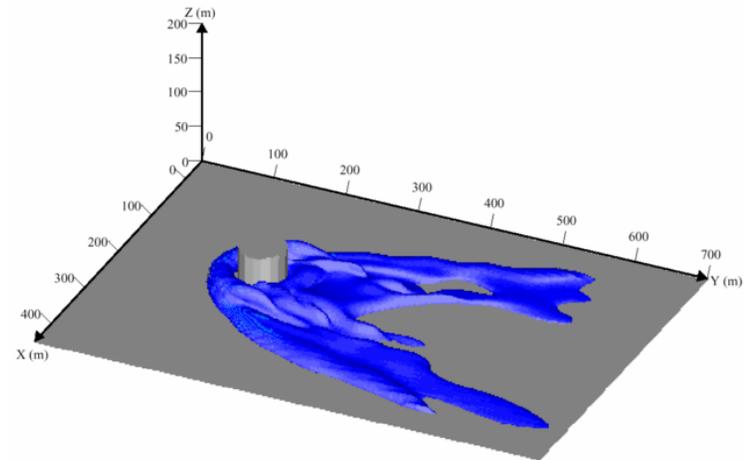
Top-hat

Un'ulteriore distinzione tra modelli di dispersione è quella basata su:

- **gas leggeri** o **galleggianti** → **dispersione passiva**
- **gas densi** o **pesanti** → **spinta di galleggiamento negativa**



Dispersione passiva



Gas denso

L'equazione di convezione-diffusione per un gas in coordinate rettangolari è:

$$\underbrace{\frac{dc}{dt}}_{\text{accumulo}} + \underbrace{u \frac{dc}{dx} + v \frac{dc}{dy} + w \frac{dc}{dz}}_{\text{contributo convettivo}} = \underbrace{K_x \frac{d^2c}{dx^2} + K_y \frac{d^2c}{dy^2} + K_z \frac{d^2c}{dz^2}}_{\text{contributo diffusivo}}$$

con c la concentrazione del gas (assenza di reazione); u , v , w le componenti di velocità longitudinale, trasversale e verticale; K_x , K_y , K_z i coefficienti di diffusione del gas (ipotesi di anisotropia).

A seconda delle ipotesi di semplificazione (isotropia della diffusione, costanza o assenza della/delle componenti di velocità) l'equazione di convezione-diffusione può avere una **soluzione analitica**. Altrimenti occorre integrarla **numericamente**.



Le equazioni di **Navier-Stokes**, ma anche quelle più ridotte ottenute da specifiche ipotesi semplificative, descrivono in principio la concentrazione, velocità e temperatura dell'atmosfera.



Nonostante tali equazioni siano comunque valide, la loro

soluzione è impedita dal fatto che il **flusso atmosferico è turbolento**.

Il **flusso turbolento** è irregolare e **casuale** (random) sicché le componenti della velocità in ogni punto cambiano in modo random nel tempo.

Dato che le componenti della velocità sono random, il loro esatto valore non può essere predetto in modo esatto.

Le equazioni summenzionate sono quindi caratterizzate da **variabili dipendenti** che sono **funzioni random**.

Di conseguenza **tali equazioni non possono essere risolte in modo esatto**. Al contrario ci si può accontentare di determinare delle opportune funzioni probabilistiche mediate per la concentrazione, velocità e temperatura.

Sia i modelli Euleriani che quelli Lagrangiani **non** sono in grado di determinare la **soluzione esatta** relativa alla concentrazione media, anche di una specie inerte, in un **flusso turbolento**.

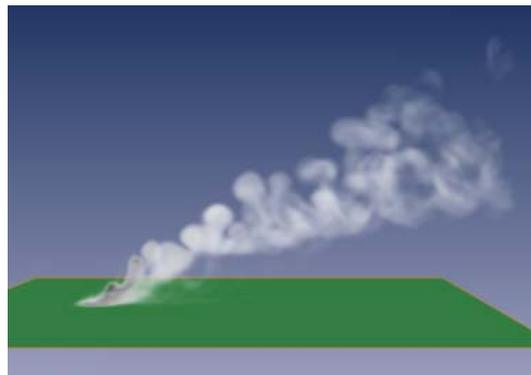
Dispersione passiva

La dispersione di un gas leggero avente una **spinta di galleggiamento neutra** (o praticamente neutra) è definita: dispersione passiva.

In generale la spinta di galleggiamento neutra è data o dall'**elevata diluizione** del gas emesso (bassa concentrazione) oppure dal suo **peso molecolare** simile a quello dell'aria circostante (in questo caso occorre che la temperatura del gas emesso e quella dell'atmosfera siano simili).

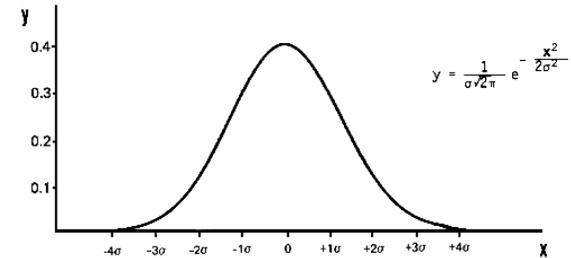
Lo studio di questa tipologia di modelli ha avuto principalmente origine per descrivere le **emissioni da camino**.

Questi modelli descrivono altresì la dispersione di sostanze a seguito di **emissioni istantanee** e **continue da terra**.



Sperimentalmente è stato rilevato che sia per rilasci istantanei che per quelli continui da una sorgente puntiforme situata a terra i profili di concentrazione sono **Gaussiani**.

Al contempo per entrambe le tipologie di rilascio la **variabilità della concentrazione cresce** con il **tempo di campionamento** della misura.



Il **pennacchio** generato da un rilascio continuo tende a **serpeggiare**. Ne consegue che la dispersione dovuta alla turbolenza risulta accresciuta.

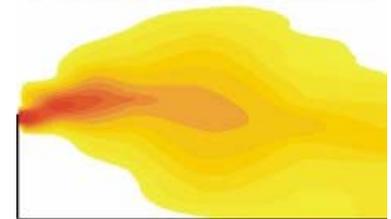
La **concentrazione** a valle del punto di emissione dipende dall'**intensità della sorgente** purché quest'ultima non sia responsabile in modo significativo del moto convettivo ceduto al fluido emesso.

Per l'emissione continua e puntiforme la **concentrazione è inversamente proporzionale** alla **velocità media** del vento.



I principali modelli relativi alla dispersione passiva sono quelli di:

- Roberts
- Sutton
- Pasquill
- Pasquill-Gifford



Modello di Roberts

Roberts nel primordiale lavoro del 1923 propose una **soluzione analitica** all'equazione di **convezione-diffusione**. Esiste una serie di soluzioni analitiche in funzione delle:

- condizioni iniziali ed al contorno;
- posizione della sorgente e dell'interazione con il terreno;
- emissione istantanea o continua
- isotropia o anisotropia della diffusione

Tutte queste soluzioni rispettano la distribuzione gaussiana longitudinale e trasversale rispetto alla direzione del vento.

Modello di Roberts (1923)

Se però tramite le soluzioni analitiche proposte si determina l'andamento funzionale della concentrazione rispetto alla distanza sottovento, nel caso di diffusione Fickiana costante $K_x = K_y = K_z = K = \text{cost}$ si ottiene la seguente relazione: $c \propto x^{-1}$ che è assolutamente **non consistente** rispetto alle risultanze sperimentali: $c \propto x^{-1.76}$.

Anche nel caso più generale di coefficienti di diffusione distinti ma costanti la soluzione analitica non ha riscontro quantitativo con i dati sperimentali.

Ad esempio nel caso di sorgente puntuale ed emissione continua da terra:

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi x \sqrt{K_y K_z}} \exp \left[-\frac{u}{4x} \left(\frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z} \right) \right] \quad Q = \int_{-\infty}^{+\infty} \iint c \, dx \, dy \, dz$$

N.B.: non è corretto modellare la dispersione in atmosfera basandosi sull'ipotesi di costanza del coefficiente K di Fick.

Modello di Sutton (1953)

Il fallimento del modello di diffusione semplice condusse alla ricerca di nuovi modelli più articolati.

Per rilascio puntuale continuo da terra Sutton propose:

$$c(x, y, z) = \frac{2Q}{\pi C_y C_z u x^{(2-n)}} \exp \left[-x^{n-2} \left(\frac{y^2}{C_y^2} + \frac{z^2}{C_z^2} \right) \right]$$

con:

$$Q = \int_{-\infty}^{+\infty} \int \int c \, dx \, dy \, dz \quad \text{condizione di continuità}$$

C_y e C_z parametri di diffusione

n indice di diffusione, è una costante meteorologica che è funzione della classe di stabilità.

N.B.: questa equazione è valida soltanto se $t \geq x/u$ ovvero se la durata del rilascio è superiore al rapporto tra la distanza sottovento x e la velocità del vento u .

Modelli di dispersione passiva

44

Modello di Pasquill (1961)

A partire dalla formulazione di Sutton, Pasquill propose la seguente equazione:

$$c_0 = \frac{2.8Q}{u d h \theta}$$

con:

c_0 la concentrazione a terra lungo l'asse del pennacchio

d la distanza sottovento [m]

h la distribuzione verticale [m]. Pasquill propose: $h = 2.15 \cdot d \cdot \sigma_\phi$

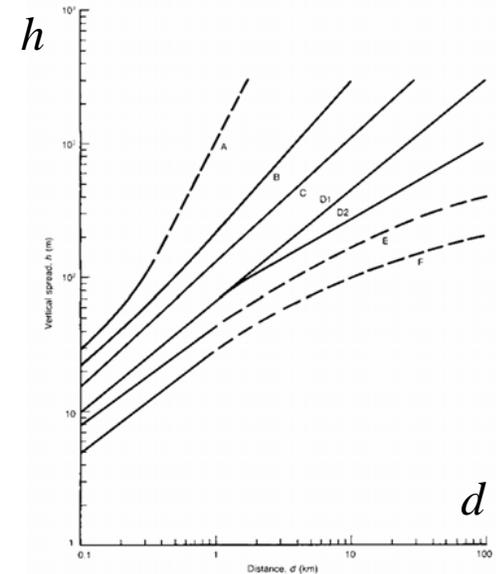
θ la distribuzione laterale [°]. Pasquill propose: $\theta = 4.3 \sigma_\theta$ con $\sigma_\theta \approx \sigma_y/x$

σ_ϕ la deviazione standard della inclinazione del vento rispetto al terreno

σ_θ la deviazione standard della direzione del vento

σ_y la deviazione standard della concentrazione in direzione trasversale al vento

N.B.: l'aspetto importante della formulazione di Pasquill è che essa dipende dalle classi di stabilità meteorologica. Quindi le grandezze presenti nell'equazione non sono costanti bensì variano con le condizioni meteorologiche.



Tratto da Lees, 1996

Modello di Pasquill-Gifford (1961)

Il modello di Pasquill-Gifford si basa sui coefficienti di dispersione proposti da Sutton (1953). Ad esempio per una dispersione puntuale continua da terra vale la seguente dipendenza funzionale:

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{\pi \sigma_y \sigma_z u} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2} \right) \right]$$

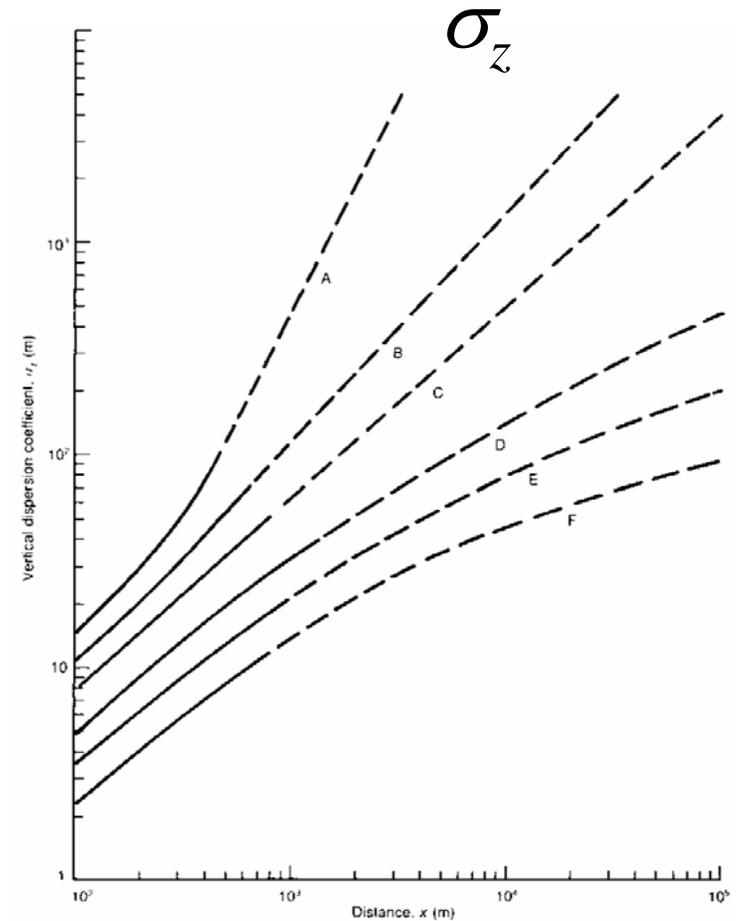
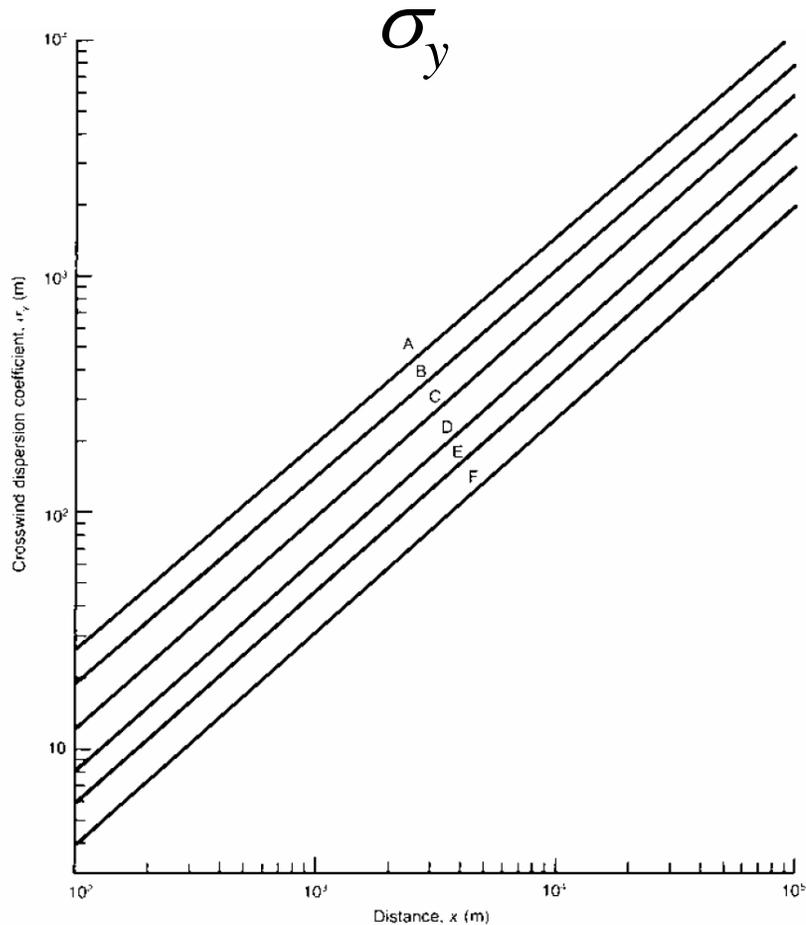
con σ_y e σ_z le **deviazioni standard** della **velocità del vento** in direzione **trasversale** e **verticale**. L'aspetto fondamentale dei coefficienti di dispersione è che dipendono dalla **distanza sottovento** e dalla **classe di stabilità** meteorologica: A—F.

Solo per aperta
campagna



Pasquill stability category	Dispersion coefficient		
	σ_y (m)	σ_z (m)	
A	$\sigma_y = 0.493x^{0.88}$	$\sigma_z = 0.087x^{1.10}$	$100 < x < 300$
B	$\sigma_y = 0.337x^{0.88}$	$\log_{10} \sigma_z = -1.67 + 0.902 \log_{10} x + 0.181(\log_{10} x)^2$	$300 < x < 3000$
		$\sigma_z = 0.135x^{0.95}$	$100 < x < 500$
C	$\sigma_y = 0.195x^{0.90}$	$\log_{10} \sigma_z = -1.25 + 1.09 \log_{10} x + 0.0018(\log_{10} x)^2$	$500 < x < 2 \times 10^4$
		$\sigma_z = 0.112x^{0.91}$	$100 < x < 10^5$
D	$\sigma_y = 0.128x^{0.90}$	$\sigma_z = 0.093x^{0.85}$	$100 < x < 500$
		$\log_{10} \sigma_z = -1.22 + 1.08 \log_{10} x - 0.061(\log_{10} x)^2$	$500 < x < 10^5$
E	$\sigma_y = 0.091x^{0.91}$	$\sigma_z = 0.082x^{0.82}$	$100 < x < 500$
		$\log_{10} \sigma_z = -1.19 + 1.04 \log_{10} x - 0.070(\log_{10} x)^2$	$500 < x < 10^5$
F	$\sigma_y = 0.067x^{0.90}$	$\sigma_z = 0.057x^{0.80}$	$100 < x < 500$
		$\log_{10} \sigma_z = -1.91 + 1.37 \log_{10} x - 0.119(\log_{10} x)^2$	$500 < x < 10^5$

Tratto da Lees, 1996



Dispersione trasversale e verticale della velocità del vento secondo il modello di **Pasquill-Gifford** in funzione delle classi di stabilità meteorologica. Sorgente puntuale e continua da terra. Aperta campagna.

Tratto da Lees, 1996

Modello di Pasquill-Gifford (1961)

Analogamente per un **rilascio istantaneo** da **terra** vale l'equazione:

$$c(x, y, z, t) = \frac{2Q}{\sqrt{2\pi^3} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2} + \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2} \right) \right]$$

dove le coordinate x, y, z fanno riferimento all'origine della nube che si muove ad una velocità media u .

Altri modelli

Sempre a partire dall'equazione di convezione-diffusione, altri autori proposero nuovi modelli detti "**teoria K**". Essi si basano sulla dipendenza del coefficiente di diffusione K da altre grandezze (profilo di velocità del vento, quota, distanza sottovento, ...).

Furono poi introdotti ulteriori modelli per la dispersione in **aree urbane**; su **suoli** aventi **profilo articolato**; dietro ad **ostacoli** quali edifici, siepi, muri, ...; in **condizioni di calma**; in situazioni di **inversione termica** e **fumigazione**; per **aree costiere** e **zone marittime**.

Con il termine “**gas densi**” (o “gas pesanti”) si intendono quei gas la cui **densità** [kg/m³] è maggiore rispetto a quella dell’aria atmosferica.

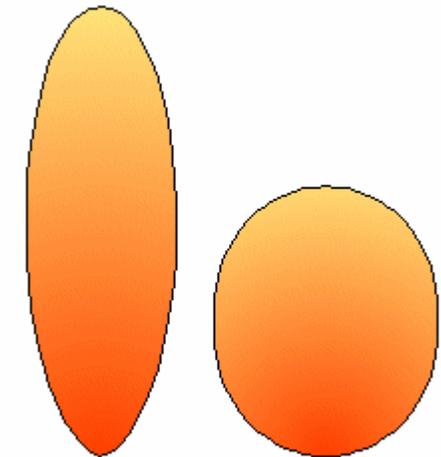
Un elevato numero di gas dell’industria di processo hanno una spinta di galleggiamento negativa, sono cioè gas densi. Sono proprio questi gas a giocare un ruolo rilevante nella stima del rischio.

Qualche esempio: idrocarburi, cloro, ammoniaca, acido fluoridrico, ossigeno, ...

Si rammenta che la densità di un gas, ρ , dipende dal:

- peso molecolare,
- temperatura del gas,
- presenza di uno spray liquido
- temperatura ed umidità dell’aria circostante

Se un gas ha peso molecolare superiore a quello dell’aria e la sua temperatura è uguale o inferiore a quella atmosferica allora è denso.



dispersione
passiva

dispersione
gas denso

Si possono avere gas con peso molecolare più basso di quello dell’aria che hanno comunque una densità superiore a causa della bassa temperatura.

La presenza di uno spray liquido può rendere il gas denso. L'evaporazione delle goccioline di liquido sottrae calore al gas facendolo raffreddare.

La densità della nube di gas è funzione anche della umidità dell'aria. La condensazione delle goccioline di acqua cede calore alla nube facendola scaldare.

In genere una nube di gas tende ad avere una densità maggiore quando si mischia con aria secca piuttosto che umida. Infatti se la nube fredda è in presenza di aria secca, si ha una condensazione delle goccioline di acqua (umidità) inferiore rispetto alla presenza di aria umida. Dato che la condensazione libera calore, allora l'aria umida si scalda di più di quella secca e la sua densità risulta inferiore.

Una serie di esperimenti ha permesso di evidenziare che la dispersione di gas quali propano, GNL, ammoniacca, cloro ed acido fluoridrico produce delle nubi dense.

N.B.: la nube di gas denso disperdendosi trascina aria e si diluisce. Diminuisce così la sua densità finché si passa da dispersione di gas denso a dispersione passiva tipica cioè di gas aventi spinta di galleggiamento neutra.

Alcuni esempi

- **Cloro:** il PM del Cl_2 è 70.91 mentre quello dell'aria è 28.84. Quindi anche alla temperatura atmosferica il cloro è denso. A maggior ragione quando viene emesso liquido e vaporizza dato che $T_{eb} = -34^\circ C$.

$$\rho_{aria}^{25^\circ C} = 1.18 \quad \rho_{Cl_2}^{25^\circ C} = 2.90 \quad \rho_{Cl_2}^{-34^\circ C} = 3.61 \frac{kg}{m^3}$$

- **Metano:** il PM del CH_4 è 16 quindi è decisamente più leggero dell'aria. Comunque alla temperatura di ebollizione normale, $-161^\circ C$, il metano è più denso dell'aria.

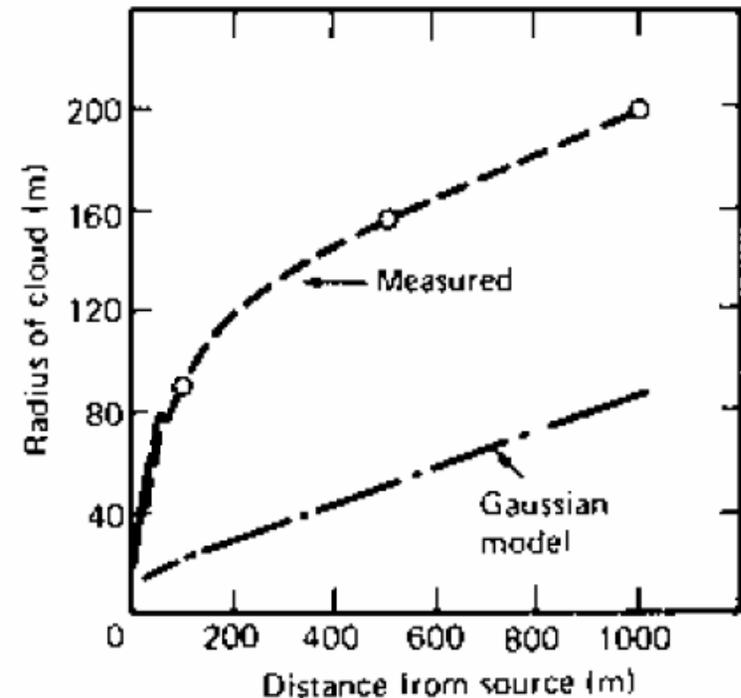
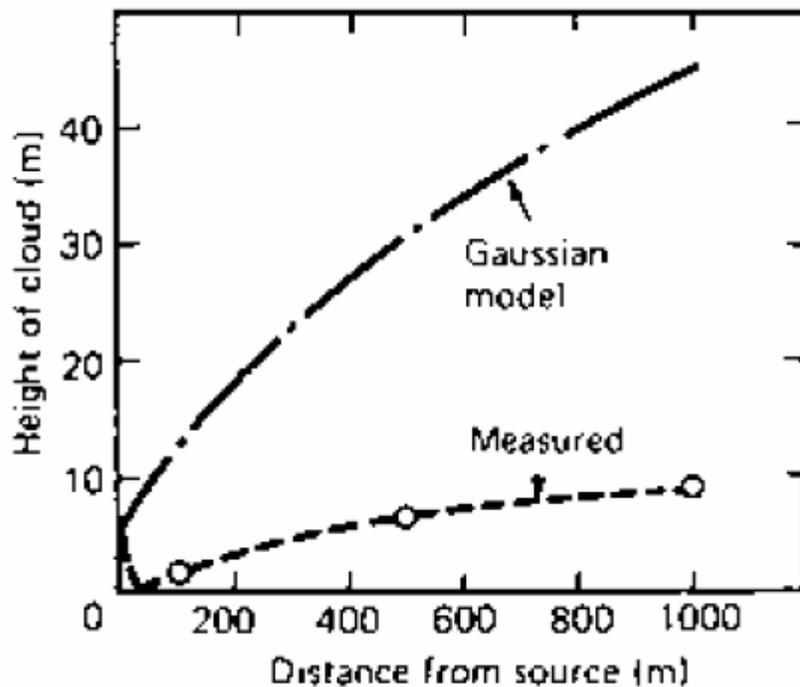
$$\rho_{aria}^{25^\circ C} = 1.18 \quad \rho_{CH_4}^{25^\circ C} = 0.654 \quad \rho_{CH_4}^{-161^\circ C} = 1.74 \frac{kg}{m^3}$$

- **Ammoniaca:** il PM della NH_3 è 17 quindi è più leggera dell'aria anche alla temperatura di ebollizione normale, $-33^\circ C$. Comunque le nubi di ammoniaca tendono ad essere più pesanti dell'aria a causa della presenza di uno spray liquido.

$$\rho_{aria}^{25^\circ C} = 1.18 \quad \rho_{NH_3}^{25^\circ C} = 0.695 \quad \rho_{NH_3}^{-33^\circ C} = 0.863 \frac{kg}{m^3}$$

Gli esperimenti condotti da Van Ulden nel 1974 su gas densi misero in evidenza un **completo disaccordo** con l'ipotesi di **distribuzione gaussiana** della concentrazione e quindi con le risultanze dei modelli gaussiani.

Ciò significa che occorre sviluppare una serie di **modelli ad hoc per gas densi** basati su ipotesi ed equazioni differenti rispetto a quelle della dispersione passiva.



Tratto da Lees, 1996

Quando una nube di gas denso viene emessa (ad esempio a seguito dello scoppio di un serbatoio) si ha subito un **trascinamento** di **aria** in ragione di un rapporto di 10-20 a 1. Il comportamento della nube è successivamente influenzato dalla gravità. Si hanno le seguenti fasi:

- **collasso gravitazionale.** La nube si schiaccia a terra allargando velocemente il proprio raggio e riducendo conseguentemente l'altezza.
- **diffusione gravitazionale.** La nube si diffonde sul terreno ancora gravata da una spinta negativa.
- **dispersione passiva.** La diluizione originata dall'aria trascinata conduce ad una dispersione avente spinta di galleggiamento neutra.



La differenza di densità esistente tra la nube gassosa e l'atmosfera circostante ha quattro effetti principali:

- si ha una significativa **accelerazione orizzontale** della nube
- si ha uno **sforzo tangenziale** dovuto al gradiente di velocità
- si ha un'**inibizione del mescolamento** verticale ad opera della turbolenza atmosferica e causato dalla stratificazione. Il mescolamento della nube è cioè poco sensibile alla classe di stabilità meteorologica.
- influenza sull'**inerzia della nube**



evaporazione di azoto liquido

La dispersione di gas denso ha in genere origine dal rilascio di un gas liquefatto.

Si hanno le seguenti casistiche:

- **Rilascio da serbatoio pressurizzato**

- Piccolo foro nella zona gas del serbatoio → getto di vapore che dissipa velocemente la propria quantità di moto → nube di gas denso
- Grande foro, rottura catastrofica, nella zona gas del serbatoio → rapida evaporazione di una frazione vapore + precipitazione di goccioline di liquido alla temperatura di ebollizione normale
- Foro nella zona liquida del serbatoio → produzione di un getto bifase con evaporazione di una frazione gassosa

- **Rilascio da serbatoio refrigerato**

- Sversamento su terreno → pozza che si allarga e vaporizza. La velocità di vaporizzazione è funzione del calore ceduto alla pozza dal terreno e tende a diminuire con il tempo. Spesso il terreno sottostante la pozza ghiaccia a causa della vaporizzazione.
- Sversamento su acqua

- **Rilascio a getto** → la vaporizzazione può avvenire in volo prima che il getto tocchi terra. La nube risultante è più fredda dell'atmosfera circostante.

I modelli di dispersione di gas densi possono essere classificati secondo tre classi distinte (Lees 1996):

- modelli convenzionali modificati
- modelli a scatola (box) e a lastra (slab)
- modelli detti "teoria K " ed altri modelli tridimensionali

Modelli convenzionali modificati

Dato che i modelli per gas densi ebbero origine notevolmente dopo quelli Gaussiani, il primo approccio fu quello di partire da tali modelli (ad es. Pasquill-Gifford) modificando empiricamente i parametri di diffusione K e C .

Tali modelli non ebbero un grande successo in quanto il comportamento di un gas denso è notevolmente differente rispetto a quello avente spinta di galleggiamento neutra o positiva.

Tale approccio modellistico dovette essere scartato.

Modelli a scatola

La nube di gas è considerata avere forma di frittella. Le proprietà sono uniformi in direzione trasversale e verticale.

Sono proposte delle correlazioni che descrivono la dinamica del raggio e dell'altezza della nube cilindrica.

L'aria viene trascinata dal moto della nube. La concentrazione all'interno della nube è uniforme grazie all'ipotesi di miscelazione istantanea.

Il modello è semplificato e proprio per questo motivo ha una serie di limitazioni e controindicazioni.

Esempio: HEGADAS

Modelli teoria K

Questi modelli si basano sulle equazioni di conservazione della massa, energia e quantità di moto con condizioni iniziali ed al contorno.

All'inizio i coefficienti di diffusione, K , furono scelti in modo da semplificare la trattazione matematica e fornire una soluzione analitica. L'avvento di computer potenti ed algoritmi numerici dedicati permise di rilassare la formulazione ed al contempo di incrementare il dettaglio descrittivo dei coefficienti K .

Esempio: SIGMET

Modelli κ - ε

In questi modelli la diffusività turbolenta K viene correlata all'energia turbolenta κ e alla dissipazione di energia ε secondo la formula:

$$K \propto \frac{\kappa^2}{\varepsilon}$$

La diffusività turbolenta K è soggetta a repentini cambiamenti locali che sono ancor più significativi a causa della densità elevata del gas disperso.

Esempio: HEAVYGAS

Modelli di Van Ulden

Van Ulden a partire dall'attività sperimentale del 1974 propose nei successivi quindici anni una serie di modelli modificati e corretti nelle ipotesi iniziali.

Dapprima la nube si allarga sul terreno schiacciata dalla gravità. Successivamente si ha dispersione di tipo Gaussiano.

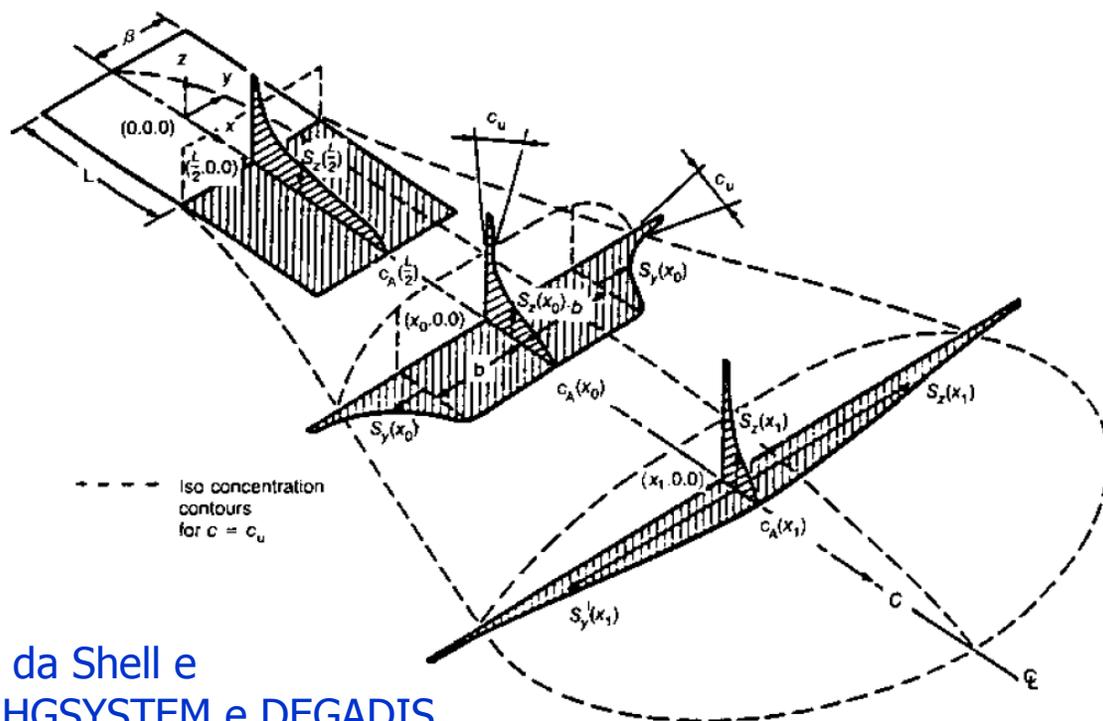
Altri autori tra cui De Haan, De Nevers, Cox e Roe ampliarono e modificarono i modelli originariamente proposti da Van Ulden.

Modelli di Cox e Roe

La nube è descritta come una serie di fette trasversali, aventi concentrazione uniforme, che si muovono in direzione del vento allargandosi per la gravità.

La **transizione** da **gas denso** a **dispersione passiva** si ha quando la velocità di allargamento laterale della nube, dovuta alla **turbolenza** atmosferica, sorpassa quella dovuta alla **gravità**.

Da questo momento in poi si adottano le equazioni relative ad una dispersione Gaussiana da **sorgente lineare finita**.



Modello HEGADAS sviluppato da Shell e successivamente ampliato in HGSYSTEM e DEGADIS

Tratto da Lees, 1996

	UK AEA - SRD		LLNL			
	CRUNCH	DENZ	SLAB	FEM3	FEM3 A,B,C,CB, D	FEM3 CHEM
Gas dispersion	- dense gas	- dense gas	- dense gas - neutral gas - positive buoyant	- LNG - heavy gas - neutral gas	- LNG - heavy gas - neutral gas	- LNG - heavy gas - neutral gas (chem/bio agents)
Release type	- vertical area - evap pool	- vertical area - evap pool	- horizontal jet - vertical jet - pool - instantaneous	- pool - direct	- pool - direct	- pool - direct
Release duration - continuous - instantaneous	yes no	no yes	yes yes	yes yes	yes yes	yes yes
Coastal release	no	no	no			
Indoor release	no	no	no	no	no	no
Time limitation	no	no	no	no	no	no
Space limitation	no	no	user defined	no	10 km	10 km
Complex terrain	no	no	no	yes	yes	yes
Urban area	no	no	no	no	yes	yes
Aqueous solutions	not known	not known	not known	no	no	no
Height of the output	no	no	yes	no	no	no
Decision about reported data	no	no	no	no	no	no
Chemical reactions	no	no	no	no	no	yes
GUI	no	yes	no	yes	yes (only FEM3D)	yes
Availability	freeware	freeware	freeware	freeware		
Source code availability	yes	yes	yes			
Model - transition	Box model Gaussian model	Box model Gaussian model	Slab model 1D Gaussian model	3D model	CFD model	CFD model
Commercial version (if available)			- slab View (990\$) - slab 3D View (990\$) - haz slab (995 \$) - BREEZE SLAB			
Comments	1978 Multiple runs with different stability classes	1978	1983	1982-84	FEM3C - The sample problems required 1.5 and 19.5 CPU hours on a DEC VAX11/780 for supercomputers only	

	LANL HIGRAD	SHELL HEGADAS	HEAVYGAS
Gas dispersion		- heavy gas (do not use for buoyant gas or gas that becomes	
Release type		- area source - pool (post LPOLL) - jet (post AEROPLUME)	
Release duration - continuous - instantaneous	yes yes	yes yes	
Coastal release	no	no	
Indoor release	yes	no	yes
Time limitation	no	no	
Space limitation	10 - 100 km	no	
Complex terrain	yes	yes	
Urban area	yes	no (limitations in surface roughness)	
Aqueous solutions	no	no	
Height of the output	yes	no	
Decision about reported data	no	yes (many degree of freedom)	
Chemical reactions	no	no	
GUI	yes		
Availability			
Source code availability			
Model - transition	CFD model	Box model no transition	$k-\epsilon$ model
Commercial version (if available)		1980	
Comments		It is a software suite based on several modules HEGADAS is the HGSYSTEM model for heavy gas dispersion from area sources.	

	EPA							
	DEGADIS	ALOHA	CALPUFF	AERMOD	BLP	CALINE3	CTDM-PLUS	OCD
Gas dispersion	- heavy gas - neutral gas - no buoyant gas	- dense gas - neutral gas	- neutral (pollutant)	- neutral (pollutant)	- buoyant	- neutral (particulate)	- neutral (pollutant)	- neutral (pollutant)
Release type	- area source - jet (only vertical releases and releases in still air)	- pool source - tank source - direct source - pipe source	- point source - volume source - area source - line source	- multiple sources - point source - area source - volume source	- line source - point source	- line source	- elevated point source	- line source - point source - area source (offshore sources)
Release duration - continuous - instantaneous	only stable conditions yes yes	yes yes	yes yes	yes no	yes no	yes no	yes no	yes no
Coastal release	no	no	yes	no	no	no	no	effects on coastal sites
Indoor release	no	no	no	no	no	no	no	no
Time limitation	1-2 hour recommended	1h	up to 5 years	from 1 hour to some years	from 1 hour to one years	1 day	from 1 hour to one years	?
Space limitation	LFL/2	10 km	hundreds of km	up to 50 km	< 50 km	< 50 km	< 50 km	?
Complex terrain	no	no	yes	yes	no	no (different surface roughness)	yes	no
Urban area	no	no	yes	yes	no	yes	yes	no
Aqueous solutions	no	no	aqueous reaction	no	no	no	no	no
Height of the output	no	no	no	yes (multiple receptors grid allowed)	yes (multiple receptors grid allowed)	yes (multiple receptors grid allowed)	yes	yes (multiple receptors grid allowed)
Decision about reported data	no	no	no	yes	yes	no	yes	yes
Chemical reactions	no	no	yes for SO ₂ , SO ₄ ⁼ , NO _x , HNO ₃ , NO ₃ ⁻	Exponential decay of pollutant	Exponential decay of pollutant	no	no	Exponential decay of pollutant
GUI	no	yes	yes	no	no	no	post processor	no
Availability	freeware	freeware	freeware	freeware	freeware	freeware	freeware	freeware
Source code availability	yes	no	yes	yes	yes	yes	yes	yes
Model	Box model Not gaussian (hp: sy = sz) - transition	Box model (heavy gas) DEGADIS Gaussian model	Gaussian	Gaussian plume dispersion	Gaussian plume dispersion	Gaussian plume dispersion	Gaussian point dispersion model	Gaussian
Commercial version (if available)	1985 - BREEZE HAZ DEGADIS (1495 \$)		- BREEZE CALPUFF - CALPUFF View (4945\$)					
Comments	VAX or PC Adaptation of HEGADAS	2004		It substitutes ISC3 Meteorological data are evaluated once an hour Pre-processor: AERMET, AERMAP	Pre-processor: PCRAMMET For aluminium reduction plant BLP = Buoyant Line and Point Source Dispersion Model	Designed to estimate the concentrations of nonreactive pollutants from highway traffic	CTDMPLUS = Complex Terrain Dispersion Model Plus Algorithms for Unstable Situations	OCD = Offshore and Coastal Dispersion Model Applicable for overwater sources where onshore receptors are below the lowest source height. Pre-processor: PCRAMMET Post-processor: ANALYSIS

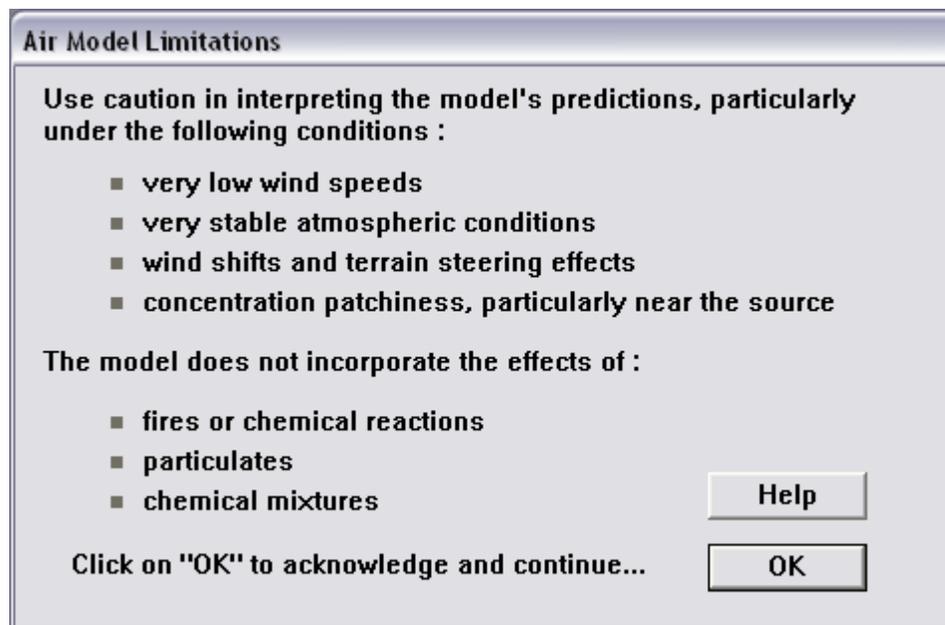
	Roberts	Sutton	Pasquill	Pasquill-Gifford	Van Ulden family			
					Van Ulden	de Nevers	Cox and Roe	Cox and Carpenter
gas	- neutral gas	- neutral gas	- neutral gas	- neutral gas	- dense gas	- dense gas	- dense gas	- dense gas
release type	- puff - plume	- puff - plume	- puff - plume	- puff - plume				
release duration								
- continuous	yes	yes	yes	yes	yes (finite wind velocity)	yes	yes	yes (wind)
- instantaneous	yes	yes	yes	yes	yes (still air)	yes	no	yes (both wind and still air)
comment	Fickian diffusion	gaussian	gaussian	gaussian	two stage model: gravity slumping + gaussian dispersion		cloud = series of crosswind slices of uniform concentration	cloud = series of crosswind slices of uniform concentration

Legenda

- LLNL Lawrence Livermore National Laboratory
- LANL Los Alamos National Laboratory
- ASG Atmospheric Studies Group
- UK AEA United Kingdom Atomic Energy Authority
- SRD Safety and Reliability Directorate
- EPA Environmental Protection Agency
- NOAA National Oceanographic and Atmospheric Administration

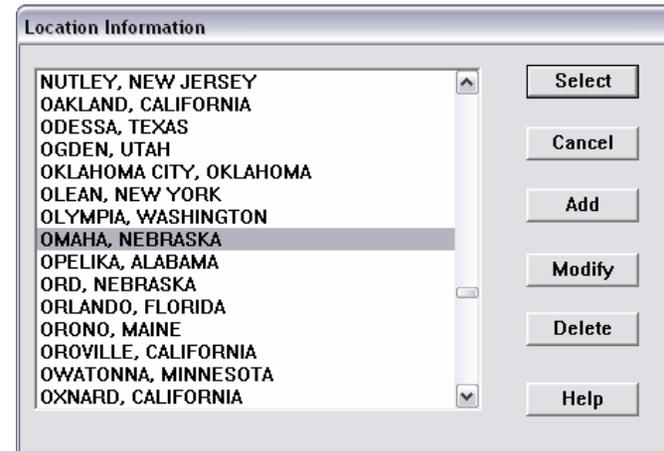
ALOHA® - Areal Locations of Hazardous Atmospheres

<http://www.epa.gov/ceppo/cameo/index.htm>



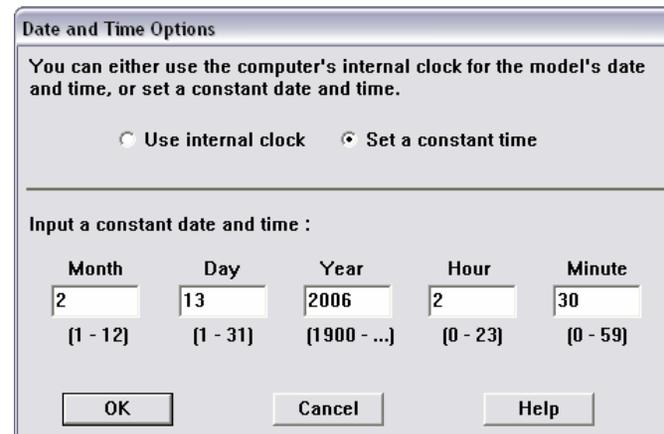
WARNING INIZIALE

Selezione del luogo
(latitudine)



A dialog box titled "Location Information" with a list of city names and state abbreviations. The list includes: NUTLEY, NEW JERSEY; OAKLAND, CALIFORNIA; ODESSA, TEXAS; OGDEN, UTAH; OKLAHOMA CITY, OKLAHOMA; OLEAN, NEW YORK; OLYMPIA, WASHINGTON; OMAHA, NEBRASKA (highlighted); OPELIKA, ALABAMA; ORD, NEBRASKA; ORLANDO, FLORIDA; ORONO, MAINE; OROVILLE, CALIFORNIA; OWATONNA, MINNESOTA; OXNARD, CALIFORNIA. To the right of the list are buttons for "Select", "Cancel", "Add", "Modify", "Delete", and "Help".

Selezione dell'istante della dispersione
(stagione ed ora del giorno)



A dialog box titled "Date and Time Options" with the following text: "You can either use the computer's internal clock for the model's date and time, or set a constant date and time." Below this text are two radio buttons: "Use internal clock" (unselected) and "Set a constant time" (selected). A horizontal line separates this section from the input fields. Below the line, the text "Input a constant date and time :" is followed by five input fields: "Month" (value 2, range [1 - 12]), "Day" (value 13, range [1 - 31]), "Year" (value 2006, range [1900 - ...]), "Hour" (value 2, range [0 - 23]), and "Minute" (value 30, range [0 - 59]). At the bottom are buttons for "OK", "Cancel", and "Help".

Tipologia degli edifici e del terreno
circostante al luogo di emissione

Infiltration Building Parameters

Select building type or enter exchange parameter

Enclosed office building

Single storied building

Double storied building

No. of air changes is per hour

Select building surroundings

Sheltered surroundings (trees, bushes, etc.)

Unsheltered surroundings

Selezione della sostanza emessa

Chemical Information

View: Pure Chemicals
 Solutions

CARBONYL FLUORIDE
CARBONYL SULFIDE
CARENE
CHLORAMINE
CHLORINE
CHLORINE DIOXIDE
CHLORINE PENTAFLUORIDE
CHLORINE TRIFLUORIDE
CHLOROACETONE
CHLOROACETONITRILE
CHLOROACETYL CHLORIDE
2-CHLOROACRYLONITRILE
CHLOROANILINE

Definizione delle condizioni meteo:
direzione e velocità del vento,
copertura nuvolosa.

Rugosità del terreno, z_0

Atmospheric Options

Wind Speed is : Knots MPH Meters/sec

Wind is from : Enter degrees true or text (e.g. ESE)

Measurement Height above ground is:

  OR enter value : Feet Meters

Ground Roughness is :

Open Country Urban or Forest OR Input Roughness [z_0] : in cm

Select Cloud Cover :

   OR enter value :
 [0 - 10]

complete cover partly cloudy clear

Definizione delle condizioni meteo:
temperatura dell'aria, eventuale
presenza dello strato di inversione,
umidità dell'aria

Atmospheric Options 2

Air Temperature is : Degrees F C

Stability Class is : A B C D E F

Inversion Height Options are :

No Inversion Inversion Present, Height is : Feet Meters

Select Humidity :

   OR enter value : %
 [0 - 100]

wet medium dry

Il termine di sorgente può essere: emissione diretta, da pozza, da serbatoio, da tubazione.

EMISSIONE DIRETTA

definizione del flusso emesso, della sua durata e della quota di emissione

User Input Source Strength

Select source strength units of mass or volume: Help

grams kilograms pounds tons(2,000 lbs)
 cubic meters liters cubic feet gallons

Select an instantaneous or continuous source: Help

Continuous source Instantaneous source

Enter the amount of pollutant ENTERING THE ATMOSPHERE: Help

kilograms/sec kilograms/min for minutes (1-60)
 kilograms/hr

Enter source height (0 if ground source): feet meters Help

OK Cancel

WARNING sulle proprietà chimico-fisiche della sostanza emessa

Note !

This chemical may flash boil and/or result in two phase flow.

OK Help

EMISSIONE DA POZZA

definizione delle dimensioni della pozza

Puddle Input

Puddle area diameter is: square feet yards meters

Select one and enter appropriate data

Volume of puddle
 Average depth of puddle
 Mass of puddle

Average depth is: inches centimeters feet meters

EMISSIONE DA POZZA

tipologia del terreno su cui si è creata la pozza, temperatura del terreno.

Temperatura iniziale della pozza
(evidentemente la pozza deve essere liquida)

Soil Type, Air and Ground Temperature

Select ground type

Default Concrete Sandy Moist

Input ground temperature

Use air temperature [select this if unknown]
 Ground temperature is F C

Input initial puddle temperature

Use ground temperature [select this if unknown]
 Use air temperature
 Initial puddle temperature is F C

EMISSIONE DA SERBATOIO

definizione delle dimensioni del serbatoio

Tank Size and Orientation

Select tank type and orientation:

Horizontal cylinder Vertical cylinder Sphere

Enter two of three values:

length diameter feet meters

length length liters cu meters

volume volume

OK Cancel Help

EMISSIONE DA SERBATOIO

definizione delle condizioni operative o equivalentemente della massa ivi contenuta

Mass or Pressure of Gas

Enter either tank pressure OR amount of gas

mmHg

The tank pressure is : atm

psi

Pa

OR

pounds

The amount of gas is : kilograms

tons[2000 lbs]

cu ft at STP

cu m at STP

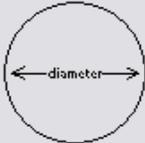
OK Cancel Help

EMISSIONE DA SERBATOIO

definizione delle dimensioni del foro o della apertura presente nel serbatoio

Area and Type of Leak

Select the shape that best represents the shape of the opening through which the pollutant is exiting

 Circular opening

 Rectangular opening

Opening diameter:

inches
 feet
 centimeters
 meters

Is leak through a hole or short pipe/valve?

Hole Short pipe/valve

EMISSIONE DA CONDOTTA

definizione delle caratteristiche
della tubazione

Pipe Input

Input pipe diameter Help

Diameter is inches cm

Input pipe length Help

Pipe length is ft yds meters

The unbroken end of the pipe is Help

connected to infinite tank source
 closed off

Select pipe roughness Help

Smooth Pipe
 Rough Pipe

EMISSIONE DA CONDOTTA

definizione delle condizioni operative e
del diametro del foro

Pipe Pressure and Hole Size

Input pipe pressure Help

Pressure is psi atm Pa

Input pipe temperature Help

Unknown (assume ambient)
 Temperature is F C

Hole size equals pipe diameter. Help

Selezione del modello

Computational Preferences

Select spreading algorithm. If unsure, let model decide. Help

Let model decide (select this if unsure)
 Use Gaussian dispersion only
 Use Heavy Gas dispersion only

Define dose: Help

Dose = $\int_0^t C^n(t) dt$ n =

OK Cancel

Limiti di soglia per le aree di danno

Level of Concern

Select Level of Concern or Output Concentration:

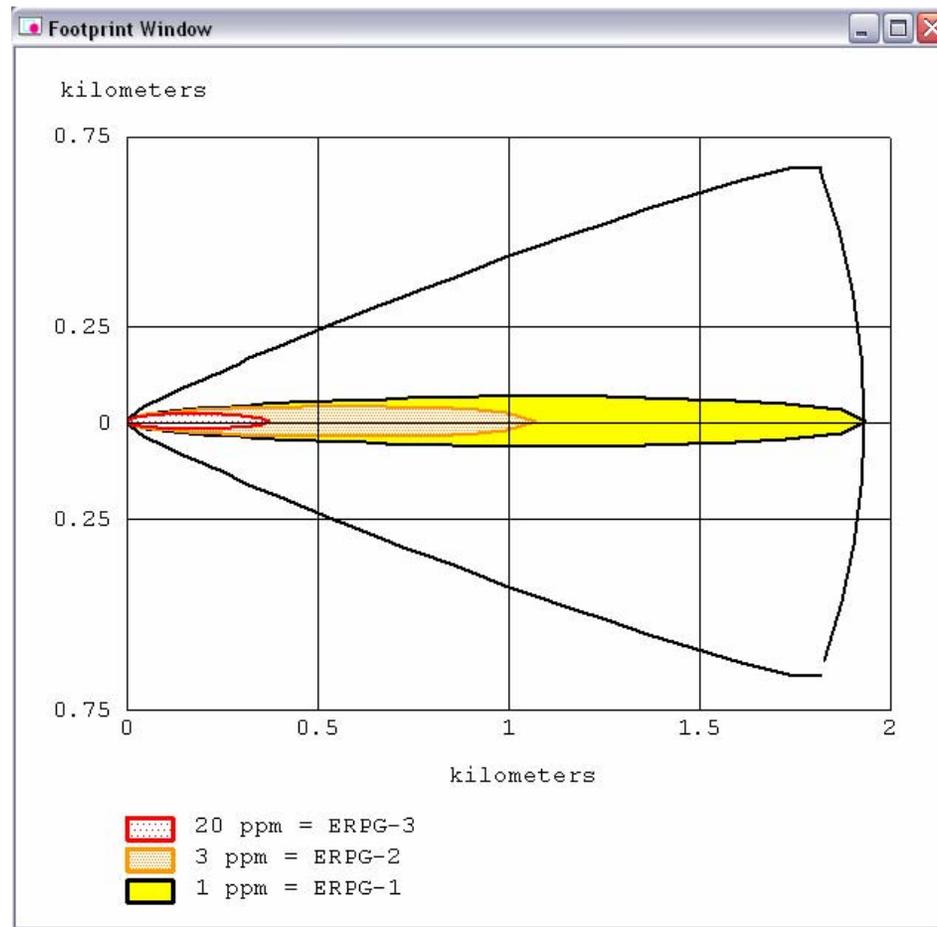
Red Footprint
LOC:

Orange Footprint
LOC:

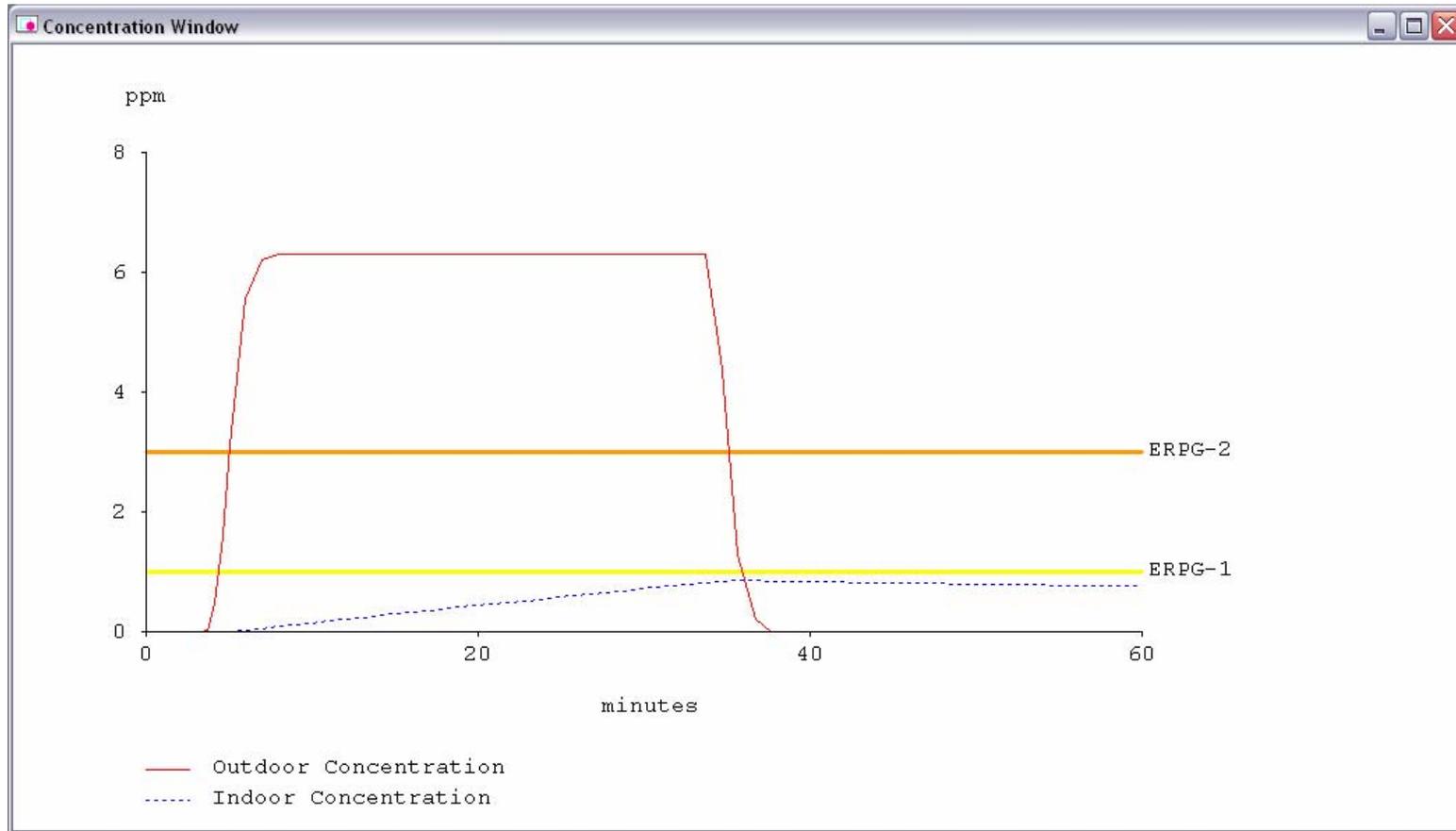
Yellow Footprint
LOC:

Show confidence lines:
 only for longest footprint
 for each footprint

OK Cancel Help



Aree di danno a seguito di un rilascio diretto di
120 kg di Cl_2 al punto di bolla in 30 minuti



Profilo temporale della concentrazione presente sia all'esterno che all'interno di un edificio distante 750 m dalla sorgente

Confronto #1, NH₃

76

		POZZA		ISTANTANEO	
Meteo					
Luogo		Boston	Boston	Boston	Boston
Tipo Edifici		Non riparato	Non riparato	Non riparato	Non riparato
		Due piani	Due piani	Due piani	Due piani
Data		15-lug	15-gen	15-lug	15-gen
Ora giorno		14:00	2:00	14:00	2:00
Velocità vento	m/s	5	2	5	2
Rugosità terreno	cm	3	3	3	3
Nuvolosità	%	0	0	0	0
Temperatura Aria	°C	30	5	30	5
Umidità	%	50	25	50	25
Classe stabilità		B	F	B	F
Sorgente		Pozza	Pozza	Puff	Puff
Area	m ²	2.50		21.81	20.60
Volume	m ³	0.10		14.60	13.39
Rapporto h/D		-	-	0.127	0.127
Altezza	m	0.04		0.67	0.65
Raggio	m	0.89		2.64	2.56
Tipo terreno		Default	Default	Default	Default
Temperatura terreno	°C	30	5	30	5
Temperatura iniziale sorgente	°C	-33.4	-33.4	30	5
		(Teb NH ₃)		(T amb)	
Densità gas	kg/m ³	0.866	0.866	0.685	0.747
Rapporto densità		-	-	2.555	2.344
Densità liquido	kg/m ³	681.6		-	-
Quantità totale	kg	68.16		10	
Tempo rilascio (ALOHA)	s	3600	3600	60	60
Max velocità di rilascio	kg/min	5.44	2.96	-	-
	kg/s	0.091	0.049	0.167	0.167
Quantità rilasciata	kg	65.20	36.00	10.0	10.0
Velocità media rilascio	kg/s	0.018	0.010	-	-
	m ³ /s	0.021	0.012		
Densità aria	kg/m ³	1.160	1.264	1.160	1.264

LC50	ppm	7338
IDLH	ppm	300
LOC	ppm	30

	mg/m ³	5576
	mg/m ³	228
	mg/m ³	23

Aree di danno		POZZA		ISTANTANEO	
ALOHA					
- LC50	m	<10	60	11	111
- IDLH	m	41	266	56	406
- LOC	m	132	724	179	947
SLAB					
- LC50	m	never	never	9	217
- IDLH	m	5	26	88	3700
- LOC	m	21	90	295	20000
CRUNCH					
- LC50	m				
- IDLH	m				
- LOC	m				
HANNA					
worst case for ALOHA distances	ppm	95	22		
	ppm	23	5		
	ppm	7	2		
worst case for SLAB distances	ppm	?	?		
	ppm	191	51		
	ppm	45	15		

Confronto #2, HCl

78

		POZZA		ISTANTANEO	
Meteo					
Luogo		Boston	Boston	Boston	Boston
Tipo Edifici		Non riparato	Non riparato	Non riparato	Non riparato
		Due piani	Due piani	Due piani	Due piani
Data		15-lug	15-gen	15-lug	15-gen
Ora giorno		14:00	2:00	14:00	2:00
Velocità vento	m/s	5	2	5	2
Rugosità terreno	cm	3	3	3	3
Nuvolosità	%	0	0	0	0
Temperatura aria	°C	30	5	30	5
Umidità	%	50	25	50	25
Classe stabilità		B	F	B	F
Sorgente		Pozza	Pozza	Puff	Puff
Area	m2	2.50		13.13	12.40
Volume	m3	0.10		6.82	6.26
Rapporto h/D		-	-	0.127	0.127
Altezza	m	0.04		0.52	0.50
Raggio	m	0.89		2.05	1.99
Tipo terreno		Default	Default	Default	Default
Temperatura terreno	°C	30	5	30	5
Temperatura iniziale sorgente	°C	-85.1	-85.1	30	5
		(Teb HCl)		(T amb)	
Densità gas	kg/m3	2.365	2.365	1.467	1.598
Rapporto densità		-	-	1.193	1.095
Densità liquido	kg/m3	1193.9		-	-
Quantità totale	kg	119.39		10	
Tempo rilascio (ALOHA)	s	1080	1980	60	60
Max rilascio	kg/min	21.6	16.2	-	-
	kg/s	0.360	0.270	0.167	0.167
Quantità rilasciata	kg	119.00	119.00	10	10
Velocità media rilascio	kg/s	0.110	0.060	-	-
	m3/s	0.047	0.025		

LC50	ppm	1108	rat	mg/m3	1802
IDLH	ppm	50		mg/m3	81
LOC	ppm	5		mg/m3	8

Aree di danno		POZZA		ISTANTANEO	
ALOHA					
- LC50	m	61	131	41	112
- IDLH	m	303	658	202	546
- LOC	m	964	2200	671	1400
SLAB					
- LC50	m	16	83	23	104
- IDLH	m	86	956	143	593
- LOC	m	287	4379	467	1700
CRUNCH					
- LC50	m	24	75		
- IDLH	m	100	479		
- LOC	m	299	1772		

u = 4,8 m/s velocità minima

Confronto #3, Cl₂

80

		POZZA		ISTANTANEO	
Meteo					
Luogo		Boston	Boston	Boston	Boston
Tipo Edifici		Non riparato	Non riparato	Non riparato	Non riparato
		Due piani	Due piani	Due piani	Due piani
Data		15-lug	15-gen	15-lug	15-gen
Ora giorno		14:00	2:00	14:00	2:00
Velocità vento	m/s	5	2	5	2
Rugosità terreno	cm	3	3	3	3
Nuvolosità	%	0	0	0	0
Temperatura aria	°C	30	5	30	5
Umidità	%	50	25	50	25
Classe stabilità		B	F	B	F
Sorgente		Pozza	Pozza	Puff	Puff
Area	m ²	2.50		8.43	7.96
Volume	m ³	0.10		3.51	3.22
Rapporto h/D		-	-	0.127	0.127
Altezza	m	0.04		0.42	0.40
Raggio	m	0.89		1.64	1.59
Tipo terreno		Default	Default	Default	Default
Temperatura terreno	°C	30	5	30	5
Temperatura iniziale sorgente	°C	-34.06	-34.06	30	5
		(Teb HCl)		(T amb)	
Densità gas	kg/m ³	3.617	3.617	2.852	3.109
Rapporto densità		-	-	0.614	0.563
Densità liquido	kg/m ³	1562.3			
Quantità totale	kg	156.23		10	
Tempo rilascio (ALOHA)	s	1560	3600	60	60
Max rilascio	kg/min	20.3	11.7	-	-
	kg/s	0.338	0.195	0.167	0.167
Quantità rilasciata	kg	156.00	148.00	10	10
Velocità media rilascio	kg/s	0.100	0.041	-	-
	m ³ /s	0.028	0.011		

LC50	ppm	293
IDLH	ppm	10
LOC	ppm	1

	mg/m ³	927
	mg/m ³	32
	mg/m ³	3

Aree di danno		POZZA		ISTANTANEO	
ALOHA					
- LC50	m	84	144	57	142
- IDLH	m	482	854	332	685
- LOC	m	1400	3000	1100	1900
SLAB					
- LC50	m	3	20	35	146
- IDLH	m	28	157	235	893
- LOC	m	94	450	708	2633
CRUNCH					
- LC50	m	118	45		
- IDLH	m	597	1346		
- LOC	m	1925	15000		

u = 2,1 m/s velocità minima

- **Lees, F.P., *Loss Prevention in the Process Industries*, Voll. 1-2-3, Butterworth, 1996**
- Lees, F.P., *Loss Prevention in the Process Industries*, Vol. 1-2-3, Butterworth-Heinemann, 2004
- Gifford, F. A. "Atmospheric dispersion calculations using generalized Garrison plume model", *Nuclear Safety*, 2, 56, 1961
- Gifford, F. A. "Use of routine meteorological observations for estimating atmospheric dispersion", *Nuclear Safety*, 2, 56, 1961
- Liou, K.N., *Radiation and Cloud Processes in the Atmosphere*, Oxford University Press, Oxford, 1992
- Pasquill, F. "The estimation of the dispersion of windborne materials", *Metallurgical Magazine*, 90, 33, 1961
- Seinfeld, J.H., Pandis, S.N., *Atmospheric Chemistry and Physics*, Wiley-Interscience, New York, 1997

Davide Manca

Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica "G. Natta"

Politecnico di Milano

Tel. 02-2399.3271

davide.manca@polimi.it

www.chem.polimi.it/homes/dmanca