

MOŽNOSTI VYUŽITÍ MODELU VIRTUÁLNÍHO ZDROJE PRO ZPŘESNĚNÍ PREDIKCE DOSAHU ZRAŇUJÍCÍCH ÚČINKŮ PŘI MASÍVNÍCH ÚNICÍCH TOXICKÝCH PLYNŮ

JAKUB MAREK^{a,b}, PETR A. SKŘEHOT^{b,c}, ZDENĚK HON^a a SLAVOMÍRA VARGOVÁ^d

^a Fakulta biomedicínského inženýrství, České vysoké učení technické v Praze, nám. Sítná 3105, 272 01 Kladno, ^b Znalecký ústav bezpečnosti a ochrany zdraví, z.ú., Ostrovského 3, 150 00 Praha 5, ^c Vysoká škola chemicko-technologická, Oddělení bezpečnosti a prevence rizik, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^d Fakulta logistiky a krizového řízení, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Studentské nám. 1532, 686 01 Uherské Hradiště, Česká republika
skrehot@zuboz.cz

Došlo 19.8.24, přijato 9.9.24.

K masivním únikům toxických látek dochází nejen při haváriích spojených s provozem průmyslových podniků, ale rovněž v rámci jejich přepravy dopravními prostředky. Tyto události představují vážnou hrozbu jak pro lidi, tak i pro životní prostředí. Zvláště nebezpečné jsou pak situace, kdy po úniku dané látky vznikají oblaky těžkého plynu. Ty se šíří velmi rychle, přičemž mají tendenci relativně dlouho setrvávat při zemském povrchu a zatékat do nejrůznějších prohlubní. Za několik minut tak může toxický plyn zasáhnout rozsáhlé území, jak to ostatně potvrzují i závěry z provedených terénních testů projektu Jack Rabbit. Poznatky o chování těžkého plynu, jakož i znalost dějů ovlivňujících jeho rozptyl v reálných podmínkách, tak poskytují důležité informace potřebné pro efektivní zvládnutí vzniklé havárie. Klíčovým údajem je přitom dosah zraňujících účinků dané nebezpečné látky, který lze získat simulací předpokládané havarijní situace za využití modelovacích software (např. ALOHA). Zásadním nedostatkem tohoto přístupu ale je, že software obvykle generuje nadhodnocené výsledky. To, že nebezpečné koncentrace v reálném prostředí nedosahují do takových vzdáleností od zdroje úniku, opakovaně prokázaly proběhlé havárie. Důvodem této diskrepance je, že používané počítačové programy neumožňují s dostatečnou přesností modelovat všechny současně probíhající fyzikálně-chemické děje, které se při rozptylu oblaků těžkého plynu uplatňují. Tento úkol je komplikovaný a s potřebnou přesností lze řešit vždy jen jeho dílčí část. Pro potřeby havarijního plánování ale tyto nepřesnosti představují poměrně zásadní omezení. Jednou z možností, jak se vypořádat s tímto problémem, je využití modelu virtuálního zdroje (někdy nazývaného též virtuální bod). Ten se s úspěchem využívá v různých oblastech, kde je potřeba zjednodušit jinak náročné fyzikální modelování časové a prostorové distribuce hmoty emitované z plošného nebo objemového zdroje. Hlavní ideou virtuálního zdroje je, že skutečný primární zdroj emise je aproximován na zdroj imaginární, který je lokalizován na jiném místě, ale působí a navenek se projevuje stejně, jako by se jednalo o reálný zdroj úniku. Klíčovým úkolem tohoto řešení je stanovení parametrů tohoto zdroje, protože pouze tak lze při následné simulaci uvažovaného havarijního scénáře získat výsledky s podstatně vyšší spolehlivostí.

Klíčová slova: těžký plyn, nebezpečné chemické látky, masivní únik, virtuální zdroj, havarijní plánování

Obsah

1. Úvod
2. Dynamika masivního úniku
3. Úskalí modelování rozptylu těžkého plynu
4. Model virtuálního zdroje
5. Aplikace modelu virtuálního zdroje pro havarijní plánování
 - 5.1. Základní východiska
 - 5.2. Lokalizace virtuálního zdroje
 - 5.3. Stanovení emisní síly virtuálního zdroje
 - 5.4. Stanovení parametrů virtuálního zdroje pomocí iterace
 - 5.5. Simulace úniku nebezpečné látky z virtuálního zdroje
6. Závěr

1. Úvod

V průmyslu se lze setkávat s celou řadou nebezpečných plynných látek, které při svém úniku do atmosféry vytvářejí oblaky těžkých plynů. Jedná se o látky, které mají vyšší molární hmotnost než vzduch ($28,96 \text{ g mol}^{-1}$), resp. se nachází ve stavu, kdy mají oproti vzduchu významně vyšší hustotu ($1,29 \text{ kg m}^{-3}$). Jedná se například o fluor, chlor, chlorovodík, ozon, fosgen nebo oxid uhličitý, resp. o plyny skladované pod vysokým tlakem nebo v kryogenním stavu, jakými jsou kupříkladu fluorovodík, amoniak, kyslík, dusík atd. Havarijní situace, při kterých dochází k rychlému úniku velkého množství nebezpečných chemických látek (v řádech desítek tun) z technologických nebo přepravních zařízení jsou označovány jako masivní úniky. Tyto situace mohou mít pro

společnost katastrofální následky¹, neboť jsou spojeny s bezprostředním a závažným ohrožením životů osob nacházejících se v zóně možného dosahu zraňujících koncentrací unikající nebezpečné chemické látky². Emise mohou v principu nastávat buď při jednorázovém úniku veškerého skladovaného množství dané látky (cca do 1 minuty), nebo při kontinuálním, pozvolném úniku (cca do 10 minut)¹⁰. Jak je známo, k masívním únikům toxických plynů v minulosti již mnohokrát došlo. Za zmínku stojí zejména havárie v Bhópálu (methylisokyanát, 1984), Hendersonu (chlor, 1991), Riverview (methanthiol, 2001), Graniteville (chlor, 2005), Šanghaj (amoniak, 2013), Al Durra/Aquaba (chlor, 2022) atd., jakož i vojenské použití chloru a yperitu v 1. světové válce. K masívním únikům může taktéž docházet při poruchách kompresorových stanic či tranzitních plynovodů.

2. Dynamika masívního úniku

Jelikož masívní úniky toxických látek představují pro společnost stále větší hrozbu, byly opakovaně studovány za účelem získání empirických zkušeností a zdokonalení používaných modelovacích nástrojů. Nejrobustnější vý-

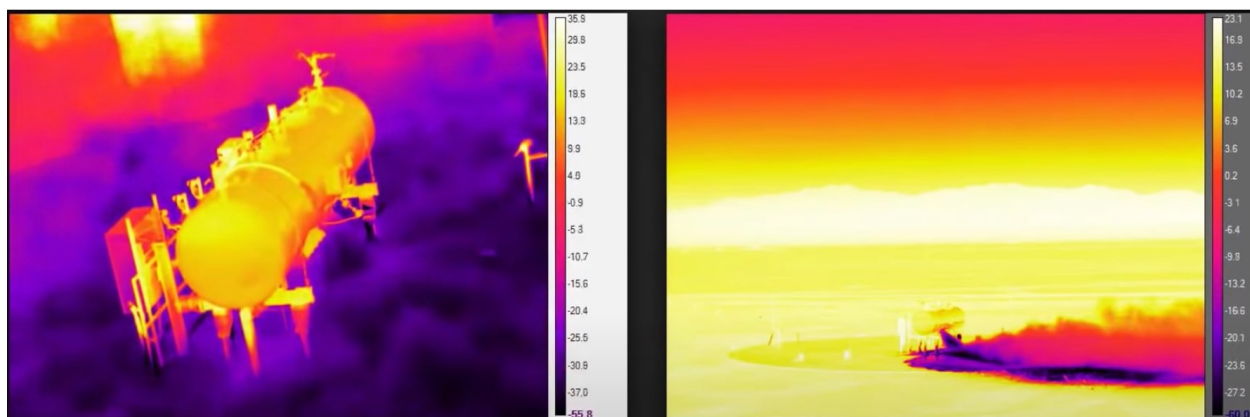


Obr. 1. Okamžik zahájení masívního úniku chloru ze zásobníku (cca 0,5 sekundy od zahájení úniku)⁸

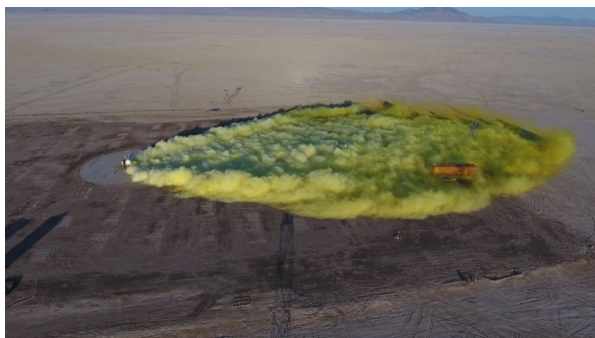
zkum byl realizován v USA v rámci projektu Jack Rabbit, který zahrnoval dvě etapy. Projekt financovalo americké ministerstvo vnitřní bezpečnosti, přičemž vlastní experimenty byly provedeny ve výcvikovém prostoru americké armády v Dugway Proving Ground v Utahu. Během deseti terénních experimentů provedených v dubnu a květnu 2010 byl simulován únik 1 až 2 tuny zkapalněného chloru, resp. plynného bezvodého amoniaku. V navazující druhé etapě byla pozornost soustředěna už jen na chlor. Od srpna 2015 do září 2016 bylo provedeno celkem devět terénních testů, při nichž bylo uvolněno 5 až 20 tun zkapalněného chloru ze stacionárního cylindrického zásobníku umístěného asi 1 m nad povrchem (viz obr. 1). Experimenty pak byly završeny únikem 20 tun chloru z automobilové cisterny³.

Z publikovaných dat a videozáznamů (např.^{3,4,8,9,11}) lze vyvodit níže uvedený chronologický popis událostí a jevů, k nimž při takto velkých únicích dochází:

- 1) Po vzniku velké ruptury v plášti zásobníku nastává dvoufázový únik kapalného chloru. Při masívním úniku nevzniká pod zásobníkem kaluž kapalného chloru, neboť proud unikajícího chloru se tříští o hranu únikového otvoru, což vytváří aerosol. Výsledkem je hustý kompaktní oblak chloru tvořený směsí kapiček a nasycených par (viz obr. 1). Asi 35 % emitovaného kapalného aerosolu okamžitě vypřehá a následně se vypaří⁴.
- 2) Vzniklý oblak má výrazně nižší teplotu než původní kapalná fáze, resp. než teplota okolního vzduchu (viz obr. 2). Oblak má vyšší hustotu než okolní vzduch, takže setrvává při zemském povrchu. Příčinou tohoto jevu je mžikový odpar, kdy dochází k velmi rychlému fázovému přechodu z kapalně do plynné.
- 3) Působením turbulence vzniklé v důsledku rychlého pohybu oblaku a jeho tření o zemský povrch oblak divoce víří a má viditelně ohraničený kupovitý vzhled. Jeho pohyb (resp. kontinuální tok) se uskutečňuje podél zemského povrchu (viz obr. 3), neboť oblak je stále velice hustý.
- 4) Oblak se velmi rychle roztéká do okolního prostoru (obr. 4). Rychlost pohybu je determinována rychlostí



Obr. 2. Masívní únik chloru ze zásobníku – záznam z termokamery⁸ (údaje jsou uvedeny ve stupních Fahrenheita, °F)



Obr. 3. Vzhled oblaku chloru během fáze tečení ve volném prostoru (15 sekund od zahájení úniku)⁹



Obr. 4. Rozšiřování oblaku chloru do prostoru (1 sekunda od zahájení úniku)⁸

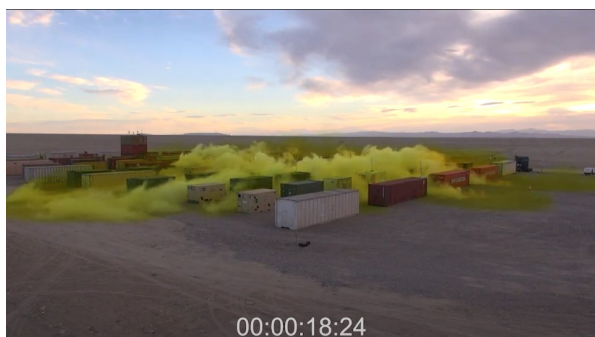
dotace nové látky do oblaku, tj. množstvím unikajícího kapalného chloru ze zásobníku, a rychlostí větru. V urbanizovaném prostředí se oblak velmi rychle šíří také mezi blízkými terénními překážkami, které obtéká nebo i přetéká (viz obr. 5). V řádu jednotek vteřin se oblak rozlije do vzdálenosti desítek metrů od epicentra úniku.

- 5) Se vzrůstající vzdáleností od místa úniku se stále více uplatňují odporové a vazké síly, což vede k výraznému zpomalení rychlosti pohybu čela oblaku. Oblak postupně ztrácí původní kupovitý tvar, homogenizuje se a vizuálně připomíná mlžný závoj (obr. 6). Při této fázi rozptylu se dominantně uplatňuje turbulentní míchání, způsobené obtékáním oblaku okolo terénních překážek, a molekulární difuze. Za stabilních povětrnostních podmínek (tj. přízemní inverze a bezvětří) pak může ojediněle docházet také ke stratifikaci oblaku, tedy k jeho rozdělení na dvě nebo více horizontálně orientovaných vrstev obsahujících plynný chlor o různé hustotě (obr. 7).
- 6) Během poslední fáze se oblak postupně naředuje vzduchem a stává se vizuálně nedetekovatelným. Při snížení koncentrace látky pod 10 000 ppm pak rozptyl přechází do pasivní fáze¹³ a *de facto* skončí úplným splynutím oblaku s okolní atmosférou. Withers a Lees⁵ uvádí, že tato fáze může nastat již ve velmi

krátké vzdálenosti od místa úniku. Tyto závěry do značné míry potvrdily také terénní testy Jack Rabbit II provedené v roce 2015, kdy se ukázalo, že koncentrace chloru se vzdáleností klesaly rychleji než bylo predikováno na základě počítačového modelování⁶. To, jak rychle přejde těžký plyn do pasivní fáze rozptylu, závisí jak na celkovém uniklém množství, tak především na povětrnostních podmínkách⁷.

3. Úskalí modelování rozptylu těžkého plynu

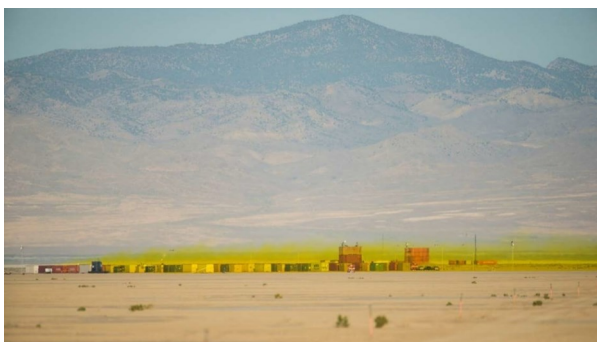
Typickou vlastností těžkých plynů je, že se v prvních fázích svého rozptylu chovají jako kapaliny^{3,10}. Jedná se o důsledek tří efektů – vysoké molární hmotnosti unikající látky, její nízké teploty a vysoké koncentrace malých kapiček aerosolu⁴. Vznikají tak velmi husté oblaky aerosolu, které v případě chloru mohou mít efektivní počáteční hustotu až 20krát vyšší než okolní vzduch¹¹. Oblak je tak zpočátku velmi kompaktní a snaží se zaujmout stabilní polohu při zemském povrchu. Pokud tomu nebrání výrazné terénní překážky, ihned se po dosažení zemského povrchu začne roztékat rovnoměrně do všech stran, přičemž směrem k okraji se jeho vertikální rozměr zvětšuje¹². Dynamika roztékání oblaku je závislá na tom, zda oblak vznikl po jednorázovém úniku nebo po úniku kontinuálním



Obr. 5. Oblak obtéká blízké překážky (18 sekund od zahájení úniku)⁸



Obr. 6. Naředění oblaku vzduchem a jeho postupná homogenizace (60 sekund od zahájení úniku)⁸

Obr. 7. Stratifikace oblaku (10 minut od zahájení úniku)¹⁰

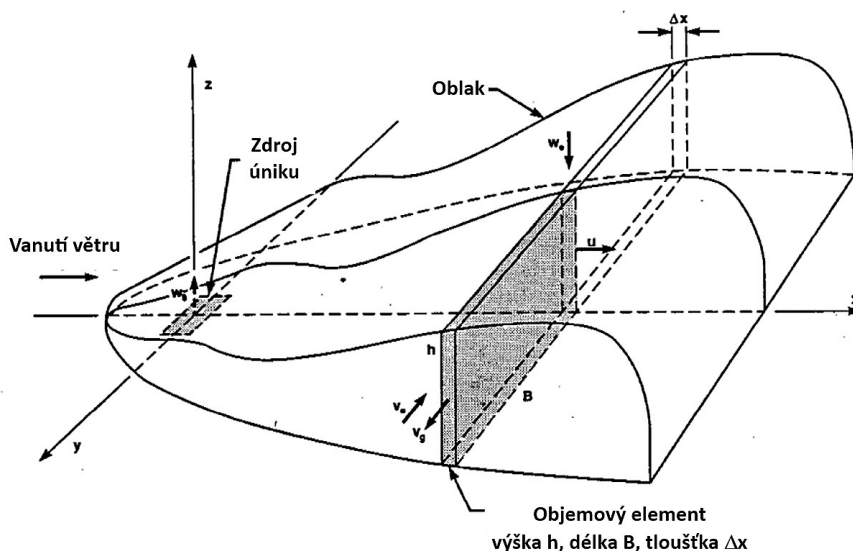
(trvajícím řádově desítky minut), případně i na orientaci výtokového otvoru. Při kontinuálním úniku pak záleží též na celkové dotaci látky za jednotku času, tj. na hmotnostní rychlosti úniku ze zdroje (kg min^{-1})^{13–15}. Jednotlivé fáze rozptylu byly podrobněji popsány v předchozí práci autorů¹⁶, a proto se jim zde nebudeme dále věnovat.

S ohledem na výše uvedené charakteristiky těžkého plynu a jeho chování po úniku ze zdroje se při modelování jeho rozptylu v atmosféře standardně postupuje tak, že se celý proces rozdělí na dva samostatné úkoly – na modelování v blízkém poli a na modelování ve vzdáleném poli. Obě pole na sebe navazují, avšak hranice mezi nimi není pevná. Za klíčový předěl lze v principu označit vzdálenost, kdy čelo oblaku začne přecházet z fáze tečení do pozitivně vzlínavé fáze. V každém z těchto polí oblaku dominují jiné fyzikálně-chemické procesy. V bezprostřední blízkosti zdroje úniku se v důsledku vyšší hustoty unikajícího plynu (oproti hustotě okolního vzduchu) neuplatňují vztahové síly, ale prakticky jen síla gravitační¹³. Slo-

žitá dynamika úniku a souvisejících fyzikálně-chemických dějů fakticky neumožňuje exaktní matematický popis procesů probíhajících v tomto oblaku, zvláště pak uplatňuje-li se šampusový efekt¹⁷. Používané modely se tak snaží jen o určitou aproximaci, což pochopitelně determinuje celkovou kvalitu výsledků simulačního výpočtu. Ten se provádí pomocí počítačových programů, neboť metoda tužka-papír by byla v tomto případě jen sotva možná.

Stávající počítačové programy pro výpočet šíření těžkého plynu v blízkém poli využívají modely verifikované podle základního box modelu vyvinutého na konci 80. let minulého století v Lawrence Livermore National Laboratory¹⁹ (viz obr. 8). Tento model je založen na předpokladu, že unikající látka se zcela a okamžitě mísí se vzduchem dostupným pro ředění, a tedy že koncentrace látky uvnitř „boxu“ je všude konstantní¹⁸. Už tento předpoklad je ale na hony vzdálený realitě, neboť distribuce hmoty uvnitř oblaku není homogenní. Dále box model předpokládá, že rozptyl disperze se uskutečňuje nad vodorovným povrchem bez jakýchkoli překážek a současně v laminárním poli proudění vzduchu. V praxi se však setkáváme především s kontinuálními úniky nebezpečných látek, k nimž dochází v členitém terénu a za povětrnostních podmínek notně vzdáleným ideálním.

V box modelu jsou určujícími silami, které mají podstatný vliv na rozptyl oblaku, pouze gravitace a vnitřní promíchávání. Rozšiřování oblaku v prostoru je po celou dobu simulovaného rozptylu rovnoměrné ve všech směrech a proudění uvnitř oblaku není vyvolané větrem vstupujícím do oblaku zvenčí, nýbrž pouze účinkem vnitřních sil, zejména účinkem teplotního gradientu a molekulární difuze. S přihlédnutím k obr. 1 až 5 je zřejmé, že tento model představuje jen velmi hrubý a značně zjednodušující popis.

Obr. 8. Grafické vyobrazení principu box modelu¹⁹

Některé softwarové nástroje využívající box model se proto snaží zohlednit také některé další děje. Například efekty nastávající při skupenských přeměnách, resp. fázových přechodech prvního řádu. Prakticky okamžitě po úniku kapalné fáze ze zdroje totiž dochází k její expanzi do volného prostoru, čímž vznikají aerosolové částice (kapičky) dané látky, které se rychle vypařují a část hmoty tak přechází do plynného skupenství⁴. Podle poznatků z terénních experimentů ale rovnováha mezi kapalným (kapičky aerosolu) a plynným skupenstvím uvnitř oblaku nastává až během závěrečné fáze tečení oblaku těžkého plynu. Navíc, jelikož je dotace látky do šířícího se oblaku postupný dynamický proces, rozptyl samotný neprobíhá v diskretních krocích charakterizovaných jednotlivými vertikálními vrstvami (označenými na obr. 8 jako Δx), jak to předpokládá právě box model. Také vliv turbulence způsobené větrem není v tomto modelu dostatečně zohledněn, neboť se jedná o proces vyznačující se značnou nahodilostí, kterou nelze matematicky seriózně popsat. Díky všem těmto omezením box model predikuje na hranici oblasti blízkého pole poměrně vysoké (nereálné) koncentrace dané látky²¹. Snaha o vyřešení těchto nedostatků pomocí zpřesňujících algoritmů ale do výsledného výpočtu leckdy vnáší jen další chybu²⁰.

V oblasti vzdáleného pole (tj. cca dále jak 100 metrů od zdroje úniku) softwarové nástroje již dosahují kvalitativně lepších výsledků. Ve výpočtu totiž automaticky přecházejí na Gaussovské modely, které popisují pasivní rozptyl látek v atmosféře. Tyto modely umožňují dosahy koncentrací počítat prakticky až do nekonečné vzdálenosti od zdroje, neboť Gaussovský model je funkce hmoty a prostoru. Čistě matematicky vzato tak hodnota koncentrace dané látky je nulová až v nekonečnu. Ani Gaussovské modely si ale nedokáží dobře poradit s vlivem turbulence, ani s terénními překážkami, které se na ředění oblaku významně podílejí. A čím je oblak více naředen vzduchem, tím dříve nastává pozitivně vzlínávací fáze (tj. vznos), a dále již na něj nepůsobí překážky na zemském povrchu, které rozptyl obvykle brzdí. To je také hlavní důvod, proč Gaussovské modely též poskytují nepřesné a nadhodnocené výsledky, jak to ostatně potvrdily provedené terénní testy i zkušenosti z proběhlých havárií^{11,13}.

4. Model virtuálního zdroje

Některé z výše uvedených úskalí lze vcelku spolehlivě vyřešit použitím tzv. modelu virtuálního zdroje (někdy nazývaného též virtuální bod). Tento model představuje speciální postup pro zjednodušení jinak náročného fyzikálního modelování časové a prostorové distribuce hmoty nebo energie emitované z plošného nebo objemového zdroje, aniž by došlo k výraznějšímu zkeslení výsledku výpočtu. Americký institut chemických inženýrů (AIChE) uvádí, že se jedná o posun zdroje emise plynu nebo páry v prostoru tak, aby při použití Gaussovského rozptylového modelu byla emise z virtuálního zdroje stejná, jako v případě skutečného zdroje úniku²². Ústřední myšlenkou

tedy je, že virtuální zdroj, který simuluje skutečný reálný zdroj emise, se nachází mimo zájmový prostor (odtud tedy název „virtuální“)²³. Virtuální zdroj tedy představuje imaginární zdroj emise, který sice fyzicky neexistuje, ale působí, fyzikálně se chová a navenek se projevuje stejně, jako by se o reálný zdroj jednalo.

Metody založené na virtuálních zdrojích se typicky využívají k přiblížení řešení vlnového záření a problémů rozptylu řízených Helmholtzovou rovnicí²³. Tento přístup ale našel uplatnění i v řadě jiných oblastí. Jako příklad lze uvést modelování šíření seismického vlnění při zemětřesení²⁴, šíření zvuku emitovaného různými zdroji současně ve vymezeném prostoru²⁵, šíření kouřových vlecůk při požárech uvnitř tunelů²⁶, nebo také šíření pachových látek emitovaných z objektů stájového chovu hospodářských zvířat²⁷. Pro účely modelování šíření plynů při chemické havárii nicméně tento model doposud nebyl použit, navzdory tomu, že se jedná o perspektivní nástroj umožňující zpřesnit výsledky získané pomocí počítačových programů (např. ALOHA, EFFECTS, TerEx, ROZEX-Alarm a další). Ověření možnosti využití modelu virtuálního zdroje v oblasti havarijního plánování se tak pro autory této práce stalo zajímavou vědeckou výzvou.

Prvním úkolem bylo detailně prostudovat danou problematiku a popsat reálné možnosti použití modelu virtuálního zdroje pro tento účel. V následujícím kroku bylo nutné vytvořit metodiku pro jeho aplikaci a validovat ji. První část tohoto komplexního úkolu byla předmětem řešení disertační práce hlavního autora tohoto příspěvku. Následné validační experimenty pak byly provedeny v rámci projektu Studentské grantové soutěže ČVUT. S ohledem na rozsáhlost provedených prací se nelze v tomto článku věnovat danému tématu v celé šíři. Proto se dále zaměříme výlučně na prezentaci principu použití modelu virtuálního zdroje v oblasti havarijního plánování.

5. Aplikace modelu virtuálního zdroje pro havarijní plánování

5.1. Základní východiska

Modelování šíření plynů při chemické havárii standardně spočívá v tom, že se nejprve stanoví realistický scénář úniku vybrané látky z daného technologického zařízení, a to s přihlédnutím k vlastnostem této látky a parametrům zdroje úniku. Simulace se provádí za použití vybraného počítačového programu, do něhož jsou zadány nezbytné vstupní údaje a proměnné (směr a rychlost větru, teplota vzduchu, celková zataženost oblohy, třída vertikální stability atmosféry v přízemní vrstvě, velikost únikového otvoru, jeho výška nad povrchem a orientace, drsnost povrchu, charakter okolní zástavby atd.). Výsledkem simulačního výpočtu pak jsou informace o hmotnostní rychlosti úniku dané látky ze zdroje, celkové doby trvání úniku, celkového uniklého množství dané látky a dosahy zraňujících koncentrací v ovzduší (referenční hodnoty jsou v použitém počítačovém programu nastaveny ob-

vykle defaultně, nebo je lze zadat ručně). V případě, že bychom modelovali pouze tento primární zdroj, promítl bychom dosahy zraňujících koncentrací do mapových podkladů a tím by simulace byla hotova. V případě použití modelu virtuálního zdroje jsme ale teprve na začátku. Smyslem jeho použití totiž je, že nebereme v úvahu dopady úniku dané nebezpečné látky z primárního zdroje, nýbrž až ze zdroje virtuálního, který se nachází na zcela odlišném místě. Toto místo je proto nutné v zájmové lokalitě (např. v areálu chemického závodu) nejprve určit.

5.2. Lokalizace virtuálního zdroje

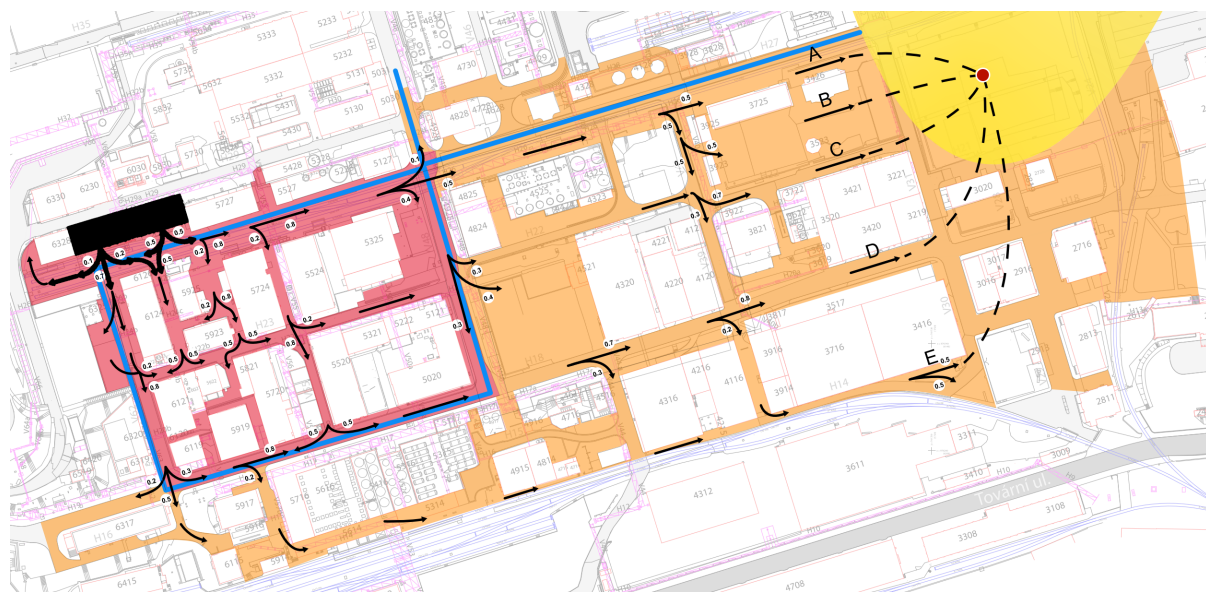
Pro lokalizaci virtuálního zdroje volíme vždy jen takové místo, které současně splňuje dvě podmínky: 1) na uvedené místo může oblak těžkého plynu emitovaný z primárního zdroje reálně dotéci a 2) plyn unikající z tohoto místa může s ohledem na okolní zástavbu, infrastrukturu apod. představovat reálnou hrozbu. Zásadně tedy nevolíme jeho umístění ve vyšší nadmořské výšce, než se nachází primární zdroj (těžký plyn se chová jako kapalina, a tedy neteče do kopce), ani místo, odkud by únik toxické látky nepředstavoval pro okolí významnější riziko. V silně urbanizovaných lokalitách je při volbě lokace nezbytné přihlídnout k okolním překážkám (zástavba, vegetace, terénní vyvýšeniny), orientaci uličních kaňonů, převažujícímu směru větru, vlivu okolní dopravy apod. Následné rozhodnutí o umístění virtuálního zdroje by v takových případech mělo být ideálně výsledkem expertního posouzení provedeného ve spolupráci s lidmi, kteří danou lokalitu dobře znají. Dalším krokem je parametrizace virtuálního zdroje, což představuje stanovení jeho emisní síly, geometrie a rozměrů.

5.3. Stanovení emisní síly virtuálního zdroje

Emisní síla je základním parametrem virtuálního zdroje. Z pohledu standardního numerického modelování se jedná o průměrnou hodnotu hmotnostní rychlosti úniku dané látky během předpokládané doby trvání emise. Stanovení emisní síly proto vyžaduje odhadnout celkové množství látky, která do virtuálního zdroje vstupuje a celkový čas trvání tohoto děje. Základní podmínkou je dodržení zákona zachování hmotnosti, tedy že množství látky, které do virtuálního zdroje za jednotku času vstupuje, musí odpovídat množství látky, které z něj vystupuje. Ve virtuálním zdroji se totiž žádná látka nezadržuje, neukládá ani netransformuje na látku jinou. Virtuální zdroj je tak určitou analogií digestoře, do které proudí plyn z různých směrů a jedním směrově orientovaným výfukem z ní zase tentýž plyn vychází.

Určení emisní síly zdroje tak vyžaduje provedení odhadu celkového množství látky unikající z primárního zdroje, které může pronikat až do oblastí, kde jsme umístili virtuální zdroj. V případě výskytu uličních kaňonů lze vycházet z výpočtu příspěvků jednotlivých proudů, které mohou téct napříč všemi dostupnými trajektoriemi a cestami. Jednotlivé dílčí proudy se následně stékají do několika hlavních proudů, jejichž součet pak představuje celkovou dotaci virtuálního zdroje (viz obr. 9).

Uvedené lze demonstrovat na ilustrativním příkladu průmyslového závodu (obr. 9), kde z primárního zdroje (černý obdélník) uniká nebezpečná látka a vznikající těžký plyn se následně šíří uličními kaňony (černé šipky). Proudění se v některých místech rozděluje, jinde se zase stékají. Při znalosti místních podmínek lze dospět k závěru, že dotaci virtuálního zdroje, který je umístěn na volném pro-



Obr. 9. Ilustrativní příklad určení toku jednotlivých proudů oblaku těžkého plynu šířícího se uličními kaňony v průmyslovém podniku

stranství (červený bod), bude tvořit pět hlavních proudů (A až E). Postupnými výpočty metodou tužka-papír lze dovodit, že proud A bude tvořit 0,295násobek emise z primárního zdroje, proud B bude tvořit 0,155násobek, proud C bude tvořit 0,125násobek, proud D bude tvořit 0,105násobek a proud E bude tvořit 0,085násobek. Celkem tak do místa virtuálního zdroje doteče 0,765násobek celkového množství uniklého z primárního zdroje.

V silně urbanizovaných oblastech je takovýto výpočet pochopitelně dosti komplikovaný a zdoluhavý. Úlohu proto lze zjednodušit tak, že se spočítá nebo konzervativně odhadne ta poměrná část emise z primárního zdroje, která bude odtékat mimo zájmovou oblast a tedy nebude součástí dotace virtuálního zdroje. Tuto hodnotu pak od hodnoty emise z primárního zdroje odečteme. Kromě těchto „odtoků“ může být dotace virtuálního zdroje podstatným způsobem ovlivněna také působením suché nebo mokré depozice. Suchá depozice představuje úbytek části látky tvořící oblak těžkého plynu v podobě částic aerosolu, které se zachytí na vertikálních nebo horizontálních površích překážek, které oblak obtéká či přetéká. Jedná se jak o částice tvořené kapalnými kapičkami z kondenzované unikající látky, tak i o kapičky vody přirozeného původu, v nichž je tato látka rozpuštěna, případně o prachové částice atmosférického aerosolu, na jejichž površích je daná látka adsorbována. Mokrý depozice pak představuje strhávání částic tvořících oblak těžkého plynu proudem padajících vodních kapek. Ty mohou vznikat přirozeným způsobem v podobě deště, nicméně v rámci havarijního plánování má smysl uvažovat pouze účinek technických skrápěcích zařízení, jakými jsou sprinklery nebo vysokotlaká mlhová zařízení.

Účinek suché nebo mokré depozice lze stanovit jen přibližně. Závisí totiž na tom, o jakou unikající chemickou látku se jedná, a také na rychlosti větru, drsnosti povrchu a poréznosti překážek. Provedené výzkumy ukázaly, že suchá depozice může vést k úbytku 30 až 50 % hmoty šířícího se oblaku^{28,29}. Velmi porézní překážky, jakými jsou například pásy vzrostlých stromů, mohou mít účinnost suché depozice až 95 % (cit.³⁰). Podobně vysoký účinek má také mokrá depozice. Skrápění pomocí sprinklerů či za použití vodní mlhy má účinnost 25 až 90 % (cit.³¹), a to v závislosti na velikosti rozprašovaných kapiček vody, vzdálenosti mezi skrápěcími hlavicemi, množství rozstříkované vody, rychlosti větru apod.

5.4. Stanovení parametrů virtuálního zdroje pomocí iterace

V předchozím kroku jsme spočítali či odhadli celkovou dotaci virtuálního zdroje a nyní je nutné definovat parametry hypotetického kulového zásobníku, který v základní aproximaci virtuální zdroj představuje. Parametrizace se provádí za využití iterace a to tak, že postupnou úpravou parametrů hledáme optimální kombinaci poloměru kulového zásobníku a velikosti unikového otvoru (průměr ruptury kruhového tvaru). Iterace se provádí pomocí vhodného počítačového programu, např. ALOHA.

Vodítkem je hmotnostní rychlost úniku látky z virtuálního zdroje, která se musí co nejvíce blížit hodnotě jeho vypočtené předpokládané dotace, tedy množství látky, které do virtuálního zdroje doteče (tj. po zahrnutí „odtoků“ a vlivu depozice – viz kap. 5.3.). Ačkoli iterace spočívá v řadě opakování a vyžaduje si určitou zkušenost při práci s použitým modelovacím software, jedná se v principu o práci rutinní povahy.

5.5. Simulace úniku nebezpečné látky z virtuálního zdroje

Jakmile provedeme všechny výše uvedené kroky, získáme potřebné údaje pro vlastní modelování virtuálního zdroje. Virtuální zdroj pro účely simulace aproximujeme hypotetickým kulovým zásobníkem, který obsahuje pouze danou chemickou látku v plynném skupenství. Plyn uniká kruhovým otvorem o definovaném průměru po dobu odpovídající úniku dané látky z primárního zdroje. Za využití zvoleného počítačového programu se následně do výpočtu zadají další nezbytné údaje a proměnné (viz kap. 5.1.) a získáme finální výsledek, tj. dosahy zraňujících účinků (zvolených koncentrací). Ty můžeme následně vynést do mapových podkladů (např. za využití aplikace MARPLOT nebo Google Earth).

6. Závěr

V rámci havarijní připravenosti je klíčovou informací především to, do jaké vzdálenosti mohou dosáhnout zraňující účinky, které v případě plynů reprezentují jejich toxikologicky významné koncentrace. Tato informace musí být přítom co nejpřesnější, aby bylo pro ochranu ohroženého obyvatelstva možné přijmout adekvátní opatření. Přístupy, které jsou v současnosti pro modelování úniku nebezpečných plynů standardně používány, vycházejí z premisy, že je v zájmu bezpečnosti předpokládat, že se zraňující koncentrace mohou za určitých okolností dostat i do velkých vzdáleností od zdroje emise. Tento konzervativní přístup je do jisté míry opodstatněný, avšak z praktického hlediska vede často k zavádějícím výsledkům evokujícím leckdy až katastrofické následky. To pak nutí zásahové složky provádět evakuaci osob i z oblastí, kde se ve skutečnosti zraňující koncentrace ani nemohou reálně vyskytnout, což si ovšem žádá enormní požadavky na síly a prostředky. Kromě toho je v takových situacích limitujícím faktorem čas. Nebezpečné plyny se totiž v ovzduší šíří velmi rychle. Již při slabém větru o rychlosti větru 3 m s⁻¹, který jen lehce ohýbá malé větvičky na stromech a šelestí listím, se čelo oblaku dostane do vzdálenosti jednoho kilometru už za 5,5 min, resp. do vzdálenosti dvou kilometrů za 11 min. Takto krátký čas ve větším městě nestačí ani na pouhé vyhlášení plošné výzvy k ukrytí obyvatelstva³², vezmeme-li do úvahy prodlení mezi nahlášením úniku nebezpečné látky, zpracováním této informace, jejím ověřením a následným vyhlášením pomocí jednotného systému varování a vyrozumění. Je

tudíž velmi žádoucí, aby již předpokládané scénáře možných havárií byly co možná nejrealističtější. Současně je ale nezbytné, aby získání těchto klíčových informací nebylo podmíněno složitým a finančně náročným matematickým modelováním proudění tekutin v simulovaném 3D prostoru (např. modely Computational Fluid Dynamics – CFD). Pro tento účel, jak bylo ostatně demonstrováno v tomto článku, lze s úspěchem použít model virtuálního zdroje. Ten umožňuje zpřesnit výsledky získané simulací havarijního úniku nebezpečných toxických látek za využití široce dostupných modelovacích nástrojů, jakým je například počítačový program ALOHA. Ačkoli se model virtuálního zdroje používá v různých odvětvích, v oblasti havarijního plánování dosud aplikován nebyl. Cílem tohoto článku proto bylo seznámit odbornou veřejnost s principy tohoto modelu a vysvětlit podstatu jeho praktické aplikace.

Tato práce vznikla v rámci projektu Studentské grantové soutěže ČVUT č. SGS22/205/OHK5/3T/17 „Simulace vlivu místních externalit na dosah zraňujících koncentrací těžkého plynu při chemických haváriích“.

LITERATURA

- Han S. H., Chang D.: *Int. J. Greenhouse Gas Control* 21, 72 (2014).
- Peng N., Kwok C., Chun-Ho L.: *Phys. Fluids A* 33, 103325 (2021).
- Nicholson D., Lian N., Hedrick A.: *Final Test Report for Jack Rabbit (JR) II*. U.S. Department of Homeland Security, 2017.
- Hanna S.: *Atmos. Environ.* 232, 117539 (2020).
- Withers R. M. J., Lees F. P.: *J. Hazard. Mater.* 15, 301 (1987).
- Gant S. a 12 spoluautorů: *Atmos. Environ.* 192, 218 (2018).
- Griffiths R. F., Fryer L. S.: *J. Hazard. Mater.* 19, 169 (1988).
- Byrnes A.: https://www.youtube.com/watch?v=AQk_vdj7lw&t=700s, staženo 25. 4. 2024.
- Byrnes A. a spol.: *Final Report The Jack Rabbit II Project's Impacts on Emergency Responders – Catastrophic Releases of Liquefied Compressed Chlorine 2015 – 2016 at U.S. Army Dugway Proving Ground, Utah*. Utah Valley University, 2017.
- Lees F.: *Loss Prevention in the Process Industries*, svazek 1, 2. vyd. Butterworth-Heinemann, Oxford 1996.
- Hanna S., Britter R., Argenta E., Chang J.: *J. Hazard. Mater.* 213–214, 406 (2012).
- <https://www.youtube.com/watch?v=7Gp2wx2zIRI>, staženo 25. 4. 2024.
- Skřehot P. a spol.: *Rozptyl těžkého plynu v atmosféře: Teorie-modely-experimenty*. T-Soft, Praha 2018.
- Markiewicz M. T., v knize: *MANHAZ monograph, Models and techniques for health and environmental hazard assessment and management. Part 2. Air quality modelling*. (Borysiewicz M., ed.), kap. Mathematical modelling of the heavy gas dispersion, str. 279. Institute of Atomic Energy, Otwock-Swierk 2006.
- Van Ulden A. P., v knize: *Proceedings of the Atmospheric Dispersion of Heavy Gases and Small Particle* (Ooms G., Tennekes H., ed.) str. 419. Springer, Berlin 1983.
- Skřehot P. A., Marek J., Houser F., Hon Z., Staněk M., Melicharová M., Jaňour Z., Korba P.: *Chem. Listy* 113, 553 (2019).
- Britter R., Weil J., Leung J., Hanna S.: *Atmos. Environ.* 45, 1 (2011).
- Mareddy A. R.: *Environmental Impact Assessment*. Elsevier Inc., Oxford 2017.
- Ermak D. L.: *User's Manual for SLAB: An Atmospheric Dispersion Model for Denser-Than-Air Releases*. Lawrence Livermore National Laboratory, CA (USA) 1990.
- Li C., Fang X., Sun M., Duan J., Wang W.: *Chin. J. Chem. Eng.* 60, 37 (2023).
- Hinds W. C. *Aerosol technology: Properties, Behaviour and Measurement of Airborne Particles*. 2. vyd. J. Wiley and Sons, New York 1999.
- <https://www.aisce.org/ccps/resources/glossary>, staženo 25. 4. 2024.
- Acosta S., Khajah T.: *Eng. Anal. Boundary Elem.* 159, 342 (2024).
- Entwistle E., Curtis A., Galetti E., Baptie B., Meles G.: *J. Geophys. Res.: Solid Earth* 120, 2466 (2015).
- Spagnol S., Tavazzi E., Avanzini F.: *Appl. Acoustics* 115, 61 (2017).
- Tian X., Liu C., Zhong M.: *Int. J. Therm. Sci.* 159, 106635 (2021).
- Yang Z. a 8 spoluautorů: *Atmos. Pollut. Res.* 11, 1063 (2020).
- Dillon M. B.: *J. Hazard. Mater.* 164, 1293 (2009).
- Jonsson L., Karlsson E., Thaning L.: *J. Hazard. Mater.* 124, 1 (2005).
- Karel J. a spol.: *Metodika pro realizaci výsadby dřevin pohlcujících prachové částice podél silničních komunikací i u tzv. plošných zdrojů prašnosti*. Atem – Ateliér ekologických modelů, Praha 2016.
- Schatz K. W., Koopman R. P.: *J. Loss Prevention Process Ind.* 3, 222 (1990).
- Hou J., Gai W., Cheng W., Deng Y.: *Process Saf. Environ. Prot.* 138, 90 (2020).

J. Marek^{a,b}, P. A. Skřehot^{b,c}, Z. Hon^a, and S. Vargová^d (^a Faculty of Biomedical Engineering, Czech Technical University, Prague, ^b Occupational Safety and Health Expert Institute, Prague, ^c University of Chemistry and Technology, Prague, ^d Tomas Bata University in Zlín, Faculty of Logistics and Crisis Management, Uherské Hradiště, Czech Republic): **Possibilities of Using a Virtual Source Model to Refine the Prediction of the Impact of Injurious Effects in Massive Releases of Toxic Gases**

Massive leaks of toxic substances occur not only during accidents connected with the operation of industrial enterprises, but also during their transfers by the means of transport. These events pose a serious threat to both people and the environment. Particularly dangerous are situations where dense gas clouds are formed after the release of the given substance. These spread very quickly, while they tend to remain at the earth's surface for a relatively long time and flow into various depressions. In a few minutes, the toxic gas can reach a large area, as confirmed by the conclusions from the Jack Rabbit field tests. Knowledge of the behavior of heavy gas, as well as knowledge of events influencing its dispersion in real conditions, thus provide important information needed for effective management of the resulting accident. The key data is the extent of the harmful effects of the given hazardous substance, which can be obtained by simulating the predicted emergency situation using modeling software (e.g. ALOHA). However, the fundamental

shortcoming of this approach is that these software usually generate overestimated results. The fact that dangerous concentrations in the real environment do not reach such distances from the source of leakage has been repeatedly proven by past accidents. The reason for this discrepancy is that the computer programs used do not allow to model with sufficient accuracy all the simultaneous physico-chemical processes that are applied during the dispersion of dense gas clouds. This task is far too complicated and only a part of it can be solved with the necessary precision. However, for the needs of emergency planning, these inaccuracies represent a relatively fundamental limitation. One way how to deal with this problem is to use a virtual resource (sometimes called a virtual point) model. It is successfully used in various areas where it is necessary to simplify the otherwise demanding physical modeling of the temporal and spatial distribution of matter emitted from a surface or volume source. The main idea of a virtual source is that the real primary emission source is approximated to an imaginary source that is located at a different location but acts and appears outwardly as if it were a real source of leakage. The key task of this solution is to determine the parameters of this source, because this is the only way to obtain results with significantly higher reliability during the subsequent simulation of the considered accident scenario.

Keyword: dense gas, hazardous chemicals, massive leak, virtual source, emergency planning



Užití tohoto díla se řídí mezinárodní licencí Creative Commons Attribution License 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/legalcode.cs>), která umožňuje neomezené využití, distribuci a kopírování díla pomocí jakéhokoliv média, za podmínky řádného uvedení názvu díla, autorů, zdroje a licence.