

## NÁSTROJE PRO MODELOVÁNÍ ROZPTYLU TĚŽKÉHO PLYNU URČENÝCH PRO PREDIKCI NÁSLEDKŮ CHEMICKÝCH HAVÁRIÍ

Petr Adolf Skřehot<sup>1</sup>, Zdeněk Hon<sup>2</sup>, Michaele Melicharová<sup>3</sup>

### ABSTRAKT

Příspěvek popisuje důvody vytvoření softwarového modulu DEGAS určeného pro modelování šíření těžkého plynu za různých povětrnostních podmínek, který bude implementován do expertního systému TerEx. Řešení předpokládá ověření modelu pro rozptyl těžkého plynu prostřednictvím terénních zkoušek a srovnávacích (verifikačních) testů.

### Klíčová slova:

modelování; těžký plyn; terénní testy; software.

### ABSTRACT

This paper looks into the reasons for creating a software module using DEGAS designed for modeling heavy gas under different weather conditions, which would be implemented with the expert system TerEx. Solutions include a verification model for the dispersion of heavy gas through field tests and comparative (verification) tests.

### Key words:

Modeling; Heavy Gas; Field Tests; Software.

## 1 ÚVOD

Při provozování chemických technologií, stejně jako při každé jiné lidské činnosti, se nelze vyhnout vzniku nehody. Některé z nich však mohou vést k velmi závažným následkům, jako tomu bylo například v Sevesu (1976) nebo Bhópálu (1984). Právě tyto havárie ukázaly, jak je důležité mít zajištěnou kvalitní havarijní

<sup>1</sup> RNDr. Mgr. Petr Adolf Skřehot Ph.D., ERGOWORK s.r.o., Raichlova 2659/2, 155 00 Praha 5 – Stodůlky, tel.: +420 777 828 865, email: ergowork@ergowork.cz

<sup>2</sup> Mgr. Zdeněk Hon, Ph.D., ČVUT v Praze, Fakulta biomedicínského inženýrství, nám. Sítná 3105, 272 01 Kladno; tel.: + 420 224 359 973, email: zdenek.hon@fbmi.cvut.cz

<sup>3</sup> Ing. Michaela Melicharová, T-SOFT a.s., Novodvorská 1010/14, 142 01 Praha 4, tel.: +420 261 710 561/2, email: melicharova@tsoft.cz

připravenost a to na všech úrovních. Jednou z nich je i predikce šíření chemických látek v životním prostředí a odpovídající havarijní odezva směřovaná k minimalizaci dopadů působení těchto látek na lidské životy a životní prostředí. Nová směrnice Evropského parlamentu a Rady 2012/18/EU rovněž reaguje na současnou potřebu zvýšení efektivity a účinnosti havarijní připravenosti.

K vhodným nástrojům, které by umožnily zkvalitnit havarijní připravenost, patří ověřené modelovací softwarové nástroje. Jejich použitím lze dosáhnout kvalitnějších a fundovanějších rozhodnutí na základě modelování, analýz a porovnávání možných variant řešení v reálném čase.

V případě vzniku chemické havárie dochází k úniku chemických látek a směsí. Při úniku obecně platí, že plyny těžší než vzduch, kterých je většina, se šíří horizontálně při zemském povrchu, jen pozvolna se naředují vzduchem a mohou pronikat do velkých vzdáleností od zdroje úniku. Podobně se chovají také plyny skladované ve zkapalněném stavu, které mají menší molekulovou hmotnost než vzduch.

## 2 PRINCIP ŠÍŘENÍ TĚŽKÉHO PLYNU

V okamžiku uvolnění do atmosféry se některé plyny nebo aerosoly chovají jinak, než jak by odpovídalo klasickému gausovskému modelu rozptylu. V závislosti na vnějších podmínkách tyto disperze setrvávají po určitou dobu v podobě oblaku těžšího než vzduch, který se postupně naředuje vzduchem, zahřívá se od zemského povrchu a postupně snižuje svou relativní hustotu. Tato fáze negativního vzlínání, během níž je dominantní silou gravitace a nikoli vztlak, je velmi obtížně fyzikálně popsatelná a tím pádem také složitě predikovatelná v rámci numerického modelování.

Uvedenou problematikou se v 60. letech 20. století zabývali již Pasquill (15) s Giffordem (4), kteří typizovali podmínky determinující charakter rozptylu na základě vertikálního teplotního zvrstvení atmosféry. Tento přístup však byl pouze kvazi empirický, nebyl dostatečně přesný a neumožňoval provádět interpolace na malá měřítka. Až teprve v důsledku nárůstu četnosti a závažnosti průmyslových havárií způsobených toxickými plyny se začala tomuto tématu věnovat větší pozornost. Od 70. let 20. století proto byly postupně navrhovány různé matematické modely, které byly v následně od 80. let 20. století také experimentálně ověřovány (např. 8, 11, 12, 14, 16). Každý nový poznatek vedl k dalšímu zpřesňování existujících modelů nebo navržení přístupů zcela nových (např. 1, 5, 2, 3, 7, 10, 17, 20).

Většina z uvedených variantních řešení modelu těžkého plynu se však spoléhala na homogenní distribuci drobných kapiček kapalné fáze v rozptylujícím se oblaku a na termodynamickou rovnováhu kapaliny a plynu uvnitř něj. Postupem času se ale ukázalo, že řešení tohoto problému je příliš složité a vyžaduje značné výpočtové kapacity, které tehdejší počítače neumožňovaly. V reakci na to byl navržen obecnější model AEROCLOUD (9, 18), který původní rovnovážný „homogenní“ model omezil pouze na aerosol tvořený kapičkami schopnými udržet se ve vznosu, které jsou v rovnovážném stavu se svými parami. Validita tohoto modelu byla následně potvrzena také dalšími autory (např. 13, 19), kteří shodně konstatovali, že zjednodušený model skutečně poskytuje dobrou shodu s experimenty a pro mnohá použití může být

dostačující. Naopak složitější varianty modelu postupně zahrnují proces vypařování a kondenzace (6) anebo chování oblaku při dvoufázovém směrovém úniku látky (21).

### 3 MODELOVACÍ SOFTWARE NÁSTROJE

Postupem doby byly navržené modely převáděny do softwarové podoby, neboť řešení navržených diferenciálních rovnic bylo prakticky možné pouze pomocí počítačů. Dominantní roli v tomto úsilí od počátku hrála americká vládní agentura US EPA, kde také vznikl v roce 1989 první numerický program DEGADIS (za spolupráce s University of Arkansas a US Coast Guard). Z něj byly postupně odvozeny další nástroje, jako např. HEDAGAS (Shell Oil's), ALOHA (US EPA a NOAA) nebo SLAB (Lawrence Livermore National Laboratory). V Evropě byly vyvinuty holandské programy EFFECTS (TNO) a SAVE II (SAVE Consulting Scientists), švédský AIRVIRO (SMHI International Consulting Services) a český Symos'97 (EKOAIR). Některé z těchto modelů umožňují provádět modelování i pro malá horizontální měřítka nebo pro podmínky městské zástavby, nicméně všechny předpokládají poměrně velkou jednorázovou nebo kontinuální dotaci unikající látky. Jejich další nevýhodou je nutnost vkládat velká množství vstupních dat (např. popis okolního terénu a podmínek uvnitř zdroje úniku), které však v praxi nejsou často dostupné, dále vysoké nároky na znalosti a dovednosti uživatelů a časová náročnost vlastní práce s programem (resp. interpretace výsledků). Využití těchto nástrojů se tak omezuje pouze na modelování očekávaných významnějších nehod při sestavování havarijních scénářů a na přípravu podkladů pro stanovení zón havarijního plánování.

Samostatnou vývojovou větví uvedených modelů jsou programy postavené na CFD modelech, jakými je například americký ANSYS Fluent (ANSYS, Inc.) nebo COMSOL Multiphysics (COMSOL, Inc.). Tyto nástroje se ale zaměřují na modelování proudění, turbulence, přenosu tepla nebo průběh chemických reakcí pro velmi malá měřítka, takže jejich potenciál pro aplikace v rámci simulace nehod a havarijního plánování je malý.

### 4 DISKUSE

Výše uvedené softwarové nástroje jsou licenčně dostupné za poměrně vysokou cenu s výjimkou programu ALOHA, která ovšem není vhodná pro modelování malých úniků. Relativně drahé nástroje jsou mimo možnosti většiny průmyslových podniků a organizací zabírajících se řešením úkolů na úseku prevence závažných havárií. Z tohoto důvodu se stále častěji objevuje poptávka po alternativním softwarovém nástroji. Požadavky na jeho uživatelskou přívětivost a nízkou cenu nicméně vedou k nutnosti vyvinout jednoduchý nástroj vhodný pro screeningová (nikoli vědecká) modelování poskytující konzervativní výsledky (byť zatížené určitou mírou nejistoty). Vývoj takového nástroje si však kromě detailního studia uvedené problematiky nutně žádá také provedení série terénních testů, jejichž výsledky umožní validovat použitý rozptylový model.

Vývojem softwarového nástroje, který by splňoval výše uvedené požadavky, se v současné době zabývá projekt s názvem „Validace a verifikace modelu šíření a disperze těžkého plynu za specifických situací (DEGAS)“. Cílem projektu, který je

řešený od roku 2015 do roku 2018, je vytvoření softwarového modulu DEGAS určeného pro modelování šíření těžkého plynu za různých povětrnostních podmínek, a který bude implementován do expertního systému TerEx. Řešení projektu předpokládá ověření modelu pro rozptyl těžkého plynu prostřednictvím terénních zkoušek a srovnávacích (verifikačních) testů. Výsledkem projektu bude vyvinutý modul, který bude určený pro predikci dosahu zraňujících koncentrací plynných látek a disperzí těžších než vzduch, které představují zejména v urbanizovaných a hustě osídlených oblastech významnou hrozbu. Té lze účinně předcházet pouze dokonalou znalostí jejich chování za různých povětrnostních podmínek. Způsob a forma zadávání vstupních dat pro modelaci vyvíjeného modulu budou zohledňovat jednak stresovost situace, pro kterou bude software určen, jednak znalosti o charakteru a formě vstupních dat cílovou skupinou uživatelů, včetně možnosti propojení s mapovým systémem pro zobrazení výsledků v mapě.

V rámci realizace projektu bude důležitá především příprava a vlastní provedení terénních testů. Výběr vhodných stopovačů těžších než vzduch představuje zásadní úkol, neboť je potřeba vybrat látku/směs, která bude splňovat tyto podmínky: bude netoxická, snadno dostupná, použitelná v podmínkách testovacího polygonu, bude moci být bezpečně uvolněna z tlakového zásobníku, bude snadno detekovatelná v ovzduší a bude cenově dostupná. Podle předběžné analýzy se jeví jako nejvhodnější varianta použití oxidu uhličitého, jehož detekce je jednoduchá a přístrojů k jeho měření je na trhu široké spektrum. Alternativní variantou je použití hydrogenuhličitanu sodného, fosforečnanu amonného nebo síranu amonného v podobě velmi jemných prášků používaných v hasicích přístrojích, avšak detekce těchto alternativních stopovačů by musela být založena na měření pomocí nefelometrů, což je nepoměrně složitější a nákladnější řešení.

Výsledný softwarový modul DEGAS bude využitelný pro komerční poradenství zaměřené na provozovatele zařazené do skupiny A, B podle zákona č.59/2006 Sb. o prevenci závažných havárií a pro výuku a vzdělávání na vysokých školách zaměřených na problematiku bezpečnosti a krizového řízení. Výstupy projektu budou sloužit i pro potřeby krizových plánů krajů či obcí s rozšířenou působností, plánů krizové připravenosti a v další bezpečnostní dokumentaci.

## **5 ZÁVĚR**

Ke zmírnění nebo k preventivní přípravě ochrany obyvatelstva, je nutné mít znalosti k odhadnutí průběhu chemické havárie. Jedním z prostředků jsou moderní modelovací softwarové nástroje, které napomáhají predikovat šíření, dopady a průběh chemických havárií. Na základě výsledků takového modelování je možné přijmout řadu různých organizačních a bezpečnostních opatření (preventivního, represivního, ochranného, záchranného a likvidačních charakteru) ke zvýšení připravenosti a snížení ohrožení obyvatelstva a životního prostředí. Z tohoto důvodu je nutné se zabývat vývojem dostupných a přitom relativně přesných modelovacích softwarových nástrojů, které budou sloužit především jako nástroje pro prognostické modelování a predikci šíření a dosahu látek ohrožujících zdraví obyvatelstva při haváriích technologických zařízení.

*Tento příspěvek vznikl za podpory Technologické agentury České republiky v rámci řešení projektu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje č. TH01031098 – „Validace a verifikace modelu šíření a disperze těžkého plynu za specifických situací (DEGAS)“.*

## LITERATÚRA

- [1] Blackmore, D., M. Herman, and J. Woodward. Heavy Gas Dispersion Models. *Journal of Hazardous Materials*, vol. 6, 1982. pp. 107–128.
- [2] Bricard, P., and L. Friedel. Two-phase Jet Dispersion. *Journal of Hazardous Materials*, vol. 59, 1998. pp. 287–310.
- [3] Britter, R. E. Recent Research on the Dispersion of Hazardous Materials, European Communities Report EUR 18198 EN, 1998, Luxembourg.
- [4] Gifford, F.A. Use of routine meteorological observations for estimating atmospheric dispersion. *Nuclear Safety*, 2, 1961. pp. 47-57.
- [5] Hanna, S. R., and P. J. Drivas. Vapor Cloud Dispersion Models, Center for the Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers, New York. 1987.
- [6] Hewitt, G. F., and M. J. Pattison. Modeling of Release and Flow of Two-phase Jets. *The Safe Handling of Pressure Liquefied Gases (IBC)*, London, 1992. November 26–27.
- [7] Koopman, R.P. [et al.]. A Review of Recent Field Tests and Mathematical Modelling of Atmospheric Dispersion of Large Spills of Denser-than-Air Gases. *Atmospheric Environment*, vol. 23, 1989. pp. 731–745.
- [8] Koopman, R.P. [et al.]. Results of Recent Large-Scale NH<sub>3</sub> and N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> Dispersion Experiments,” in *Heavy Gas and Risk Assessment III: Proceedings of Third Symposium on Heavy Gas and Risk Assessment*, Bonn, November 12–13, ed. S. Hartwig, D. Reidel, Dordrecht, 1986. pp. 137–156.
- [9] Kukkonen, J.; Vesala, T.; Kulhala, M. “The Interdependence of Evaporation and Settling for Airborne Freely Falling Droplets,” *Journal of Aerosol Science*, vol. 20, no. 7, 1989. pp. 749–763.
- [10] Markiewicz, M. Models and Techniques for Health and Environmental Hazard Assessment and Management. Warsaw : Warsaw University of Technology, The Faculty of Environmental Engineering, 2006. *Mathematical Modelling of the Heavy Gas Dispersion*, 2006. pp. 280-302.
- [11] Moodie, K. and Ewan, B.C. Jets Discharging to the Atmosphere. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 3, 1990. pp. 68–76.
- [12] Nielsen, M.S. [et al.] Field Experiments with Dispersion of Pressure Liquefied Amonia. *Journal of Hazardous Materials*, vol. 56, 1997. pp. 59–105.
- [13] Nikmo, J.; J. Kukkonen, T. Vesala, and M. Kulmala. A Model for Mass and Heat Transfer in an Aerosol Cloud. *Journal of Hazardous Materials*, vol. 38, 1994. pp. 293–311.
- [14] Nolan, P.F. [et al.]. Release Conditions Following Loss of Containment. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 3, 1990. pp. 97–103.

- [15] Pasquill, F. The estimation o the dispersion of windborene material, *Meteorol. Mag.*, 90, 1961. pp 33-49.
- [16] Schmidli, J.; Banerjee, S.; Yadigaroglu, G. Effects of Vapour/Aerosol and Pool Formation on Rupture of Vessels Containing Superheated Liquid. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 3, 1990. pp.104-111.
- [17] Spicer, T. and Havens, J. User´s Guide for the Degadis 2.1 Dense Gas Dispersion Model. 1989. US EPA. EPA-450/4-89-019.
- [18] Vesala, T., and J. Kukkonen. A Model for Binary Droplet Evaporation and Condensation, and its Application for Ammonia Droplets in Humid Air. *Atmospheric Environment*, vol. 26A, 1992. pp. 1573-1581.
- [19] Webber, D. M, S. J. Jones, G. A. Tickle, and T. Wren. A Model of a Dispersing Dense Gas Cloud and the Computer Implementation DRIFT: I. Near-instantaneous Releases, 1992. AEA Report SRD/HSE R586.
- [20] Wheatley, C. J., and D. M. Webber. Aspects of the Dispersion of Denser-than-Air Vapours Relevant to Gas Cloud Explosions, UKAEA, Safety and Reliability Directorate, Commission of the European Communities Report EUR592. 1984.
- [21] Woodward, J., and A. Papadourakis. Modeling of Droplet Entrainment and Evaporation in a Dispersing Jet. in *Proceedings of International Conference and Workshop on Modeling and Mitigating the Consequences of Accidental Releases of Hazardous Materials*, New Orleans, May 20–24, American Institute of Chemical Engineers, New York, 1991. pp. 147–167.

Článok recenzovali dvaja nezávislí recenzenti.