

**ČESKÉ VYSOKÉ
UČENÍ TECHNICKÉ
V PRAZE**

**FAKULTA
BIOMEDICÍNSKÉHO
INŽENÝRSTVÍ**



DISERTAČNÍ PRÁCE

2022

**ING. MARTIN
STANĚK**



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
FAKULTA BIOMEDICÍNSKÉHO INŽENÝRSTVÍ
Katedra zdravotnických oborů a ochrany obyvatelstva

Možnosti modelace rozptylu a šíření těžkého plynu v rámci chemických havárií

Possibilities of Modeling the Dispersion and Spread of Heavy Gas in Chemical Accidents

Disertační práce

| | |
|-------------------------|---|
| Studijní program: | Ochrana obyvatelstva |
| Studijní obor: | Civilní nouzová připravenost |
| Autor disertační práce: | Ing. Martin Staněk |
| Školitel: | doc. Mgr. Zdeněk Hon, Ph.D. |
| Školitel-specialista: | doc. RNDr. Mgr. Petr Adolf Skřehot, Ph.D., MSc. |

Kladno 2022

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem disertační práci s názvem „Možnosti modelace rozptylu a šíření těžkého plynu v rámci chemických havárií“ vypracoval samostatně pouze s použitím pramenů, které uvádím v seznamu bibliografických odkazů.

Nemám závažný důvod proti užití tohoto školního díla ve smyslu § 60 zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon), ve znění pozdějších předpisů.

V Kladně dne

.....
Ing. Martin Staněk

PODĚKOVÁNÍ

Rád bych tímto poděkoval oběma školitelům, panu doc. Mgr. Zdeňku Honovi, Ph.D., a panu doc. RNDr. Mgr. Petru Adolfu Skřehotovi, Ph.D., MSc. za odborné vedení, cenné rady, konstruktivní připomínky a konzultace při tvorbě disertační práce. Poděkování jim rovněž patří za umožnění plnohodnotně se podílet na řešení projektu DEGAS, který dal hlavní podnět ke vzniku tématu disertační práce.

ABSTRAKT

Disertační práce je zaměřena na tematiku softwarových modelací úniku, šíření a disperze nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkých plynů v atmosféře. Jejím předmětem je vymezení problematiky chemické bezpečnosti s bližším zaměřením na softwarové modelace uvedeného jevu a validitu jejich výstupů i využitelnosti v daném tématu. Cílem práce je na základě realizovaného výzkumu v rámci projektu DEGAS, na který je práce navázána, stanovení doporučení různého charakteru pro využití výstupů softwarových modelací v oblasti chemické bezpečnosti a ochrany obyvatelstva. Pro účely práce jsou stanoveny čtyři dílčí cíle a tři hypotézy.

Teoretická část práce je zaměřena na komplexní vymezení problematiky chemické bezpečnosti, včetně možných havarijních projevů úniku nebezpečných chemických látek a směsí. Dále na vymezení těžkého plynu, způsobu jeho šíření v prostředí a faktorů, které tento proces ovlivňují. Následně jsou analyzovány možnosti softwarové modelace šíření a disperze těžkých plynů v atmosféře, různé matematické modely a přístupy, jejich limity, vstupní parametry modelací a příklady softwarových nástrojů.

Praktická část práce je zaměřena na experimentální šetření, které bylo realizováno v rámci projektu DEGAS a jeho hlavní výstup, kterým bylo vytvoření stejnojmenného modulu pro modelaci šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře, který je součástí expertního softwarového nástroje TerEx. Tato část práce je dále zaměřena na analýzu validity výsledků softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu prostřednictvím modelace dopadů vybraných chemických havárií. Výsledky modelací vytvořených prostřednictvím modulu DEGAS a softwarového nástroje ALOHA, který byl v tomto případě použit jako referenční, jsou komparovány navzájem a s reálnými dopady havárií. Na základě výsledků realizovaného výzkumu je stanovena série doporučení k využití softwarových modelací daného jevu v oblasti chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a řešení chemických havárií pro podporu stanovení adekvátních opatření.

Klíčová slova

Chemická bezpečnost; nebezpečné chemické látky a směsi; těžký plyn; modelace šíření chemických látek; matematické modely; ochrana obyvatelstva

ABSTRACT

The dissertation thesis is focused on the topic of software modeling of the release, spread and dispersion of dangerous chemical substances and mixtures in the form of heavy gases in atmosphere. Its subject is the definition of the issue of chemical safety with closer focus on software modeling of the mentioned phenomenon and the validity of their outputs and usability in the given topic. The aim of the work is, on the basis of the research carried out within the DEGAS project to which the thesis is linked, the establishment of recommendations of a different character for the use of the outputs of software modeling in the field of chemical safety and population protection. Four sub-goals and three hypotheses are set for the purposes of the thesis.

The theoretical part of the thesis is focused on a comprehensive definition of the issue of chemical safety, including possible emergency manifestations of the release of dangerous chemical substances and mixtures. Furthermore, on the definition of heavy gas, the process of its spread in the environment and the factors that influence this process. Subsequently, the possibilities of software modeling of the spread and dispersion of heavy gases in atmosphere, various mathematical models and approaches, their limits, input parameters of modeling and examples of software tools are analyzed.

The practical part of the thesis is focused on the experimental research that was carried out within the DEGAS project and its main output, which was the creation of the eponymous module for modeling the spread and dispersion of heavy gases in atmosphere, which is part of the TerEx expert software tool. This part of the thesis is further focused on the analysis of the validity of the results of software modeling of the release of dangerous chemical substances and mixtures in the form of heavy gas through impact modeling of selected chemical accidents. The results of the modeling created using the DEGAS module and the ALOHA software tool, which was used as a reference in this case, are compared with each other and with the real impacts of the accidents. Based on the results of the research carried out, a series of recommendations for the use of software modeling of the given phenomenon in the field of chemical safety, population protection and solving chemical accidents is established to support the determination of adequate measures.

Keywords

Chemical safety; Dangerous chemical substances and mixtures; Heavy gas; Chemical substances spread modeling; Mathematical models; Population protection

OBSAH

| | | |
|-------|---|----|
| 1 | Úvod..... | 11 |
| 2 | cíle práce a hypotézy..... | 13 |
| 3 | přehled současného stavu..... | 15 |
| 3.1 | Vymezení oblasti chemické bezpečnosti a chemických havárií..... | 15 |
| 3.1.1 | Chemické havárie v dnešní době, jejich příčiny a dopady..... | 17 |
| 3.1.2 | Významné chemické havárie s únikem nebezpečných látek a směsí ve světě a v České republice..... | 21 |
| 3.2 | Právní předpisy a normy vymezující oblast prevence závažných havárií na úrovni Evropské unie a České republiky..... | 25 |
| 3.2.1 | Evropské předpisy a direktiva SEVESO..... | 25 |
| 3.2.2 | Právní vymezení chemické bezpečnosti v České republice..... | 26 |
| 3.3 | Vlastnosti, projevy a šíření nebezpečných chemických látek, směsí a těžkých plynů v prostředí..... | 31 |
| 3.3.1 | Charakteristika šíření těžkých plynů v prostředí..... | 36 |
| 3.4 | Modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí..... | 38 |
| 3.4.1 | Faktory ovlivňující rozptyl a šíření těžkých plynů při úniku nebezpečných chemických látek a směsí v atmosféře z pohledu modelace..... | 45 |
| 3.4.2 | Vstupní údaje nezbytné k tvorbě modelací..... | 49 |
| 3.4.3 | Limity a nedostatky softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu..... | 51 |
| 3.4.4 | Matematické modely pro modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí v prostředí a šíření těžkých plynů..... | 54 |
| 3.4.5 | Vybrané softwarové nástroje určené k modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí, včetně šíření těžkých plynů v atmosféře..... | 62 |
| 4 | Metodika..... | 68 |
| 4.1 | Experimentální šetření a terénní experimenty projektu DEGAS..... | 69 |
| 4.2 | Modelování úniku a šíření těžkých plynů a komparativní modelace prostřednictvím vybraných modelačních softwarových nástrojů..... | 75 |

| | | |
|-------|---|-----|
| 5 | Výsledky | 80 |
| 5.1 | Výsledky experimentálního šetření a terénních experimentů projektu DEGAS | 80 |
| 5.1.1 | Vymezení modulu DEGAS | 90 |
| 5.1.2 | Popis funkcionality modulu DEGAS a jeho integrace v softwarovém nástroji TerEx | 92 |
| 5.1.3 | Verifikace výsledků modelace modulu DEGAS a komparace s výsledky měření a observacemi druhého terénního experimentu | 95 |
| 5.2 | Výsledky modelace úniku a šíření těžkých plynů v podmínkách vybraných chemických havárií | 101 |
| 5.2.1 | Vybrané chemické havárie | 102 |
| 5.2.2 | Vstupní data pro modelace, jejich vyhodnocení a komparace výsledků | 104 |
| 5.2.3 | Vyhodnocení modelací úniku a šíření těžkých plynů v podmínkách vybraných chemických havárií a jejich validita | 119 |
| 5.3 | Stanovení doporučení k využití softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře v oblasti chemické bezpečnosti a ochrany obyvatelstva..... | 125 |
| 5.4 | Vyhodnocení cílů práce a hypotéz | 127 |
| 6 | Diskuze..... | 130 |
| 7 | Závěr | 160 |
| 8 | Seznam použitých zkratk | 161 |
| 9 | Seznam použité literatury..... | 163 |
| 10 | Seznam použitých obrázků | 176 |
| 11 | Seznam použitých tabulek | 177 |
| 12 | Seznam Příloh | 178 |

1 ÚVOD

V novodobé historii jsou celosvětově používány tisíce chemických látek a směsí k nejrůznějším účelům. Od každodenní lidské potřeby, například ve formě hygienických přípravků, přes deratizační prostředky, výrobu plastů, až po využití na hokejových stadionech nebo k úpravě pitné vody. K těmto účelům a pokrytí poptávky po chemických látkách, směsích a jejich produktech je především ve vyspělých zemích značně rozvinutý chemický průmysl a v asijských a rozvojových zemích dochází k jeho výraznému nárůstu v posledních letech. Riziko chemických havárií je v rámci tohoto průmyslu zcela reálné a dopady mohou být vzhledem k charakteristice uniklých látek a jejich nebezpečným vlastnostem velmi závažné. Chemický průmysl může představovat významný zdroj ohrožení pro člověka, zvířata a životní prostředí. Chemické havárie mohou mít řadu příčin. Jedná se především o technologické, výrobní, procesní a jiné příčiny, které jsou převážně technického charakteru. Nezanedbatelnou příčinu rovněž představuje lidský faktor. Jedná se zejména o neúmyslné zavinění havárie, například nedodržováním bezpečnostních předpisů či při neodborném technickém zásahu v rámci takzvaného „outsourcingu“. Lze uvažovat i o jejím cíleném zapříčinění, například ve formě teroristického útoku na chemické zařízení, zásobníky s chemickými látkami, nebo přepravní cisterny a jiné. Chemické látky byly historicky využívány i ve formě bojových otravných látek a v novodobé historii se lze setkat s užitím dostupných průmyslových chemikálií k tomuto účelu. Případně lze uvažovat chemická zařízení jakožto sekundární chemickou zbraň při zapříčinění úniku nebezpečných látek konvenčními prostředky. Obzvláště nebezpečné jsou chemické havárie, které mohou vzniknout v rozsáhlých aglomeracích nebo v jejich blízkosti z důvodu přítomnosti velkého počtu osob a vzhledem k charakteristice a nebezpečným vlastnostem uniklých látek.

Únik těchto látek nemusí vzniknout pouze ze stacionárních zdrojů, které představují zejména chemické podniky, sklady či zařízení, která chemické látky skladují a používají ke své činnosti, ale i z mobilních zdrojů, například automobilové či železniční cisterny převážející nebezpečné chemické látky a směsi. Jako příklad lze uvést řadu historicky významných a rozsáhlých chemických havárií s únikem nebezpečných látek. Například únik cyklohexanu s následným výbuchem ve Flixborough (Velká Británie, 1974), únik dioxinu v Sevesu (Itálie, 1976), nehoda automobilové cisterny s únikem bezvodého amoniaku v Houstonu (USA, 1976), únik methylisokianátu v Bhópálu (Indie, 1984), únik

amoniaku v Jonově (Litva 1989), únik chloru v rámci železniční přepravy ve městech Festus (USA, 2002) a Graniteville (USA, 2005) a řadu dalších.

Významné historické havárie měly dopady nejenom lokálního charakteru na místní obyvatelstvo a životní prostředí, ale i celosvětového na celkovou bezpečnost chemického průmyslu a nutnost stanovení důkladnějších bezpečnostních předpisů a postupů. Rovněž se neustále zvyšují požadavky v oblasti chemické bezpečnosti, havarijního plánování a přípravy na řešení chemických havárií, včetně zajištění adekvátní ochrany obyvatelstva a odezvy záchranných složek. Důležitým aspektem v této oblasti je zejména prevence a snaha haváriím předcházet, minimalizovat riziko potenciálního úniku nebezpečných látek či dalších jejich havarijních projevů. V neposlední řadě je důležité důkladně znát ohrožení, která tyto mimořádné události představují a zabývat se i charakteristikou šíření nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkých plynů v prostředí. V podmínkách České republiky je havarijní připravenost realizována v souladu s direktivou Evropské unie SEVESO III prostřednictvím zákona č. 224/2015 Sb., o prevenci závažných havárií způsobených vybranými nebezpečnými chemickými látkami nebo chemickými směsmi a o změně zákona č. 634/2004 Sb., o správních poplatcích, ve znění pozdějších předpisů, (zákon o prevenci závažných havárií), a doplňujícími právními předpisy.

S rozvojem výpočetních technologií a zvyšujícími se nároky na bezpečnost chemického průmyslu se v dnešní době využívají modelační softwarové nástroje k predikci možných dopadů potenciálních úniků nebezpečných chemických látek a směsí v rámci analýz rizik. Výsledné modelace lze využít i pro účely chemické bezpečnosti při stanovení a optimalizaci zón havarijního plánování. Tyto nástroje se v souladu s tímto trendem soustavně vyvíjejí, především v oblasti zlepšení přesnosti samotných modelací a zkvalitnění matematických modelů, dle kterých je vypočítán dosah působení určené látky při jejím úniku. V dnešní době je také kladen důraz na zkvalitnění výsledků modelací ve specifických podmínkách, například v členitém terénu či městských zástavbách. Specifické podmínky rovněž představují situace při nedostatku vstupních dat a řadě neznámých parametrů, které v průběhu samotného řešení úniku nebezpečných látek a směsí nemusí být pro provedení prvotní modelace vždy k dispozici.

2 CÍLE PRÁCE A HYPOTÉZY

Cílem práce a realizovaného výzkumu je při terénních experimentech a za pomoci vybraného stopovače ověřit chování těžkého plynu v případě jeho úniku z technologického zařízení. Jsou analyzovány časové změny v průběhu rozptylu oblaku a měřeny jeho charakteristiky (dosahy zraňujících koncentrací, distribuce v prostoru apod.). Na základě výsledků experimentů jsou navržena organizační a bezpečnostní opatření (ochranného, záchranného a likvidačních charakteru), která přispějí ke zvýšení připravenosti složek IZS a ke snížení ohrožení obyvatelstva a životního prostředí v případě chemické havárie spojené s únikem těžkého plynu.

Práce si rovněž klade za cíl vymezit problematiku chemické bezpečnosti a chemických havárií s bližším zaměřením na oblast těžkých plynů a možnosti softwarové modelace jejich šíření v prostředí za reálných podmínek. Dále bude představeno realizované experimentální šetření v rámci projektu DEGAS, jehož výsledky budou následně v práci prezentovány a výstupy využity k naplnění vytyčených cílů. K tomuto účelu jsou stanoveny čtyři dílčí cíle práce a tři hypotézy.

Dílčí cíle práce:

1. Vymezení problematiky chemické bezpečnosti a chemických havárií, včetně popisu nebezpečnosti chemických látek a směsí, jejich možných havarijních projevů při úniku a definice těžkého plynu s vymezením způsobu jeho šíření v prostředí.
2. Analyzování možností modelace úniku chemických látek a šíření těžkých plynů pomocí vybraných softwarových nástrojů, možných přístupů, matematických modelů, vymezení vstupních dat modelací i faktorů ovlivňujících šíření těžkých plynů v prostředí a výsledky modelací.
3. Experimentální ověření a analýza chování, rozptylu a šíření těžkého plynu za použití vybraného stopovače při terénních experimentech simulujících únik látky z technologického zařízení v rámci validace a verifikace výstupů projektu DEGAS.

4. Analýza validity výsledků modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu na základě výsledků komparativních modelací modulu DEGAS, modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA a porovnání výsledků s reálnými podmínkami vybraných chemických havárií. Na základě výsledků analýzy stanovení možností a způsobů využití modelací v rámci chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a řešení chemických havárií složkami IZS.

Hypotézy:

Hypotéza 1: Výsledky terénního experimentu ověřujícího chování, šíření a rozptyl těžkého plynu v atmosféře se shodují s výsledky modelace tohoto experimentu prostřednictvím modulu DEGAS.

Hypotéza 2: Výsledky modelace vybraných chemických havárií prostřednictvím modulu DEGAS se neliší o více jak 10 % při komparaci s výsledky modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA.

Hypotéza 3: Výsledky modelace šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře prostřednictvím modulu DEGAS a modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA věrohodně odpovídají reálným podmínkám analyzovaných chemických havárií.

3 PŘEHLED SOUČASNÉHO STAVU

3.1 Vymezení oblasti chemické bezpečnosti a chemických havárií

Chemické havárie představují potenciálně značně nebezpečné mimořádné události. Únik nebezpečných chemických látek a směsí nemusí vzniknout pouze z chemických zařízení a stacionárních zdrojů, ale i z mobilních, případně z produktvodů, skládek či z nelegálních skladů chemikálií. Ročně se na území EU vyrobí okolo 300 mil. tun chemických látek, z čehož více jak 80 mil. tun vykazuje vlastnosti nebezpečné pro životní prostředí a okolo 215 mil. tun pro životy a zdraví osob [1]. Z celosvětového hlediska se v posledních dekádách stala největší výrobcem a trhem s chemickými látkami Čína, za kterou ostatní oblasti světa zaostávají. Ve vyspělých zemích je produkce chemických látek a trh s nimi poměrně stabilní a vykazuje mírný dlouhodobý růst. Z těchto oblastí je celkově produkce v Evropě, Severní Americe a jihovýchodní Asii, bez započtení Číny, podobná [2].

Závažná havárie v chemickém průmyslu představuje časově a prostorově ohraničenou vzniklou nebo bezprostředně hrozící mimořádnou událost, která je částečně nebo zcela neovladatelná. Jedná se zejména o únik, požár nebo výbuch nebezpečných látek v rámci objektů, ve kterých jsou skladovány nebo využívány, a které vedou k ohrožení na životech a zdraví osob, zvířat, majetku a životního prostředí. K havárii může dojít vlivem lidského a technického faktoru, přírodních živlů jako jsou povodně, vichřice, sesuvy půdy či v důsledku požáru nebo exploze chemikálií. Dále například při teroristickém útoku s cílem narušit chod společnosti nebo následkem válečných konfliktů. Dopady chemických havárií představují buď rozptyl toxické látky s kontaminací prostředí a intoxikací osob nebo požár či výbuch s ohrožením vznikajícím v důsledku tepelného záření, tlakové vlny při výbuchu, šíření požáru a intoxikací osob zplodinami hoření [3, 4].

Závažných havárií v chemickém průmyslu či při transportu nebezpečných látek se historicky odehrálo mnoho a často si tyto havárie vyžádaly značný počet obětí, zraněných i zasažených osob, závažné ekonomické škody i dopady na životní prostředí. Od 50. let minulého století do roku 2008 lze ve světě pozorovat 64 mimořádně závažných havárií, které poukazují na velmi nebezpečný potenciál chemického průmyslu. Uvedené havárie se vyznačují ve většině případů desítkami až stovkami obětí, počtem zraněných a zasažených osob v řádech tisíců a evakuovaných v řádech až desetitisíců [4].

V posledních letech lze však sledovat i značné množství devastujících havárií spojených převážně s požárem a explozí nebezpečných látek, a to zejména v asijských a rozvojových zemích, kde jsou bezpečnostní standardy, předpisy a postupy mnohdy na nedostatečné úrovni. Jako příklad lze uvést exploze dusíkatých látek ve skladech ve městě Tianjin v roce 2015 a v chemické továrně ve městě Yancheng v roce 2019 v Číně nebo v Bejrútském přístavu v Libanonu v roce 2020, z nichž každá si vyžádala několik desítek obětí a stovky až tisíce zasažených osob.

Chemické havárie menšího rozsahu jsou poměrně častým jevem, jak dokládá databáze chemických havárií ARIA (Analysis, Research and Information on Accidents), kterou provozuje francouzská kancelář BARPI (Bureau for Analysis of Industrial Risks and Pollutions) v rámci tamního Ministerstva životního prostředí. Tato databáze čítá téměř 55 tisíc záznamů chemických havárií převážně z Francie a západní Evropy, přičemž v ní ročně přibude průměrně 1 200 nových záznamů. Jedná se ovšem nejen o nové havárie, ale i o nově zpracované analýzy historických událostí [5]. Další významnou databází monitorující chemické havárie v Evropě je eMARS (Major Accident Reporting System), která je provozována v souladu s direktivou Seveso III Evropského parlamentu a Rady 2012/18/EU. Jejím účelem je analýza, popis a evidence hlášených závažných havárií na území Evropské unie, které se odehrály v rámci chemických zařízení označovaných jako Upper nebo Lower Tier establishment. V našich podmínkách se jedná o objekty zařazené do skupiny A anebo B dle zákona o prevenci závažných havárií. Dle této databáze se v roce 2021 odehrálo na území EU 44 hlášených událostí. V roce 2020 je evidováno 38 událostí, v roce 2019 je uvedeno 29 událostí a v roce 2018 se jich odehrálo 47. V předchozích letech, od roku 2000, byl tento počet podobný jako v roce 2018, tedy zhruba 50 událostí za rok. Nejvíce havárií se dle databáze eMARS odehrálo v chemických závodech a poté v rámci petrochemických zařízení. Za první polovinu roku 2022 bylo hlášeno 6 událostí [6]. Z uvedeného vyplývá, že se ročně odehraje v Evropské unii pouze malé množství opravdu závažných havárií ve srovnání s celkovými počty všech havárií. Statistické údaje za rok 2021 a novější nemusí být úplné, jelikož řada událostí je stále v procesu vyšetřování a v databázi nejsou zatím zaneseny. Vliv na snižující se počet událostí měl i výskyt celosvětové pandemie onemocnění COVID-19, jež vedl zejména v roce 2020 k výraznému útlumu celosvětového průmyslu a dotkl se i odvětví chemického průmyslu, výroby a obchodu. Obdobných databází bychom ve světě našli celou řadu, například databáze provozovaná nezávislou federální agenturou CSB

(Chemical Safety Board) v USA nebo japonská databáze Failure Knowledge Database provozovaná neziskovou organizací Association for the Study of Failure [7, 8].

V České republice se ročně odehrají řádově tisíce mimořádných událostí a havárií s výskytem látek CBRNE, ale většinu tvoří provozní či technické události, například únik provozních kapalin při dopravní nehodě a podobné. Událostí s nebezpečným únikem, zahořením či nálezem chemických a dalších nebezpečných látek je z tohoto počtu pouze velmi malá část, řádově jednotky až desítky [9]. Jedním ze zdrojů evidujících havárie s výskytem nebezpečných látek se zaměřením na dopravu a mobilní zdroje ohrožení je Dopravní informační systém DOK Ministerstva dopravy [10].

3.1.1 Chemické havárie v dnešní době, jejich příčiny a dopady

Příčin havárií s výskytem látek CBRNE lze identifikovat celou řadu. Dle výše uvedených databází chemických havárií je jako nejčastější příčina uveden lidský faktor. Zde se může jednat o zanedbání či nedodržování bezpečnostních předpisů, úmyslné jednání nebo nedbalost. Poměrně často se zde také vyskytuje tzv. „outsourcing“, kdy je na odbornou a potencionálně nebezpečnou práci v chemickém podniku v rámci úspor najata externí firma, která ovšem nemusí mít dostatečně kvalifikované pracovníky [5]. Tímto se výrazně zvyšuje riziko havárie z důvodu nedbalosti či neznalosti přesných postupů a bezpečnostních předpisů. Jako další zdroj je identifikována technická závada, případně nesprávná, mimořádná či vadná funkce zařízení. Zde je nezbytné si uvědomit, že práce s chemickými látkami je velmi náročná na kvalitu zařízení a při provozu může docházet k rychlému opotřebení materiálů či může vzniknout náhlá a závažná chemická reakce, na kterou dané zařízení není konstruováno. Z tohoto důvodu je v této oblasti průmyslu kladen vysoký důraz na prevenci a technické revize zařízení, které přicházejí do styku s chemickými látkami. S touto příčinou je částečně spojena i možnost technologické závady, kdy může být určitý proces chybně navržen či dimenzován vzhledem k technickým kapacitám daného zařízení a může vzniknout náhlá událost nebo havárie. Jedná se například o nevhodně nastavené procesy výroby chemických látek a směsí, náhlý nárůst tlaku nebo vytvoření podtlaku uvnitř zásobníku či zařízení, náhlý vznik nežádoucí chemické reakce, výrazné změny teplot a jiné. Další příčinou je špatný technický stav zařízení, případně nedostatečné kontroly. Tato příčina je spojena například se špatnou těsností v zařízení, nadměrným namáháním materiálů, stářím zařízení či jeho

opravami. Nedostatečné kontroly jsou dále spojovány opět s potenciálně nevyhovujícím technickým stavem zařízení, tvorbou a nahromaděním nečistot či vedlejších produktů ve výrobním procesu nebo při skladování. Dále s neadekvátním zjištěním stavu zařízení před zahájením provozu nebo neplatnými revizemi zařízení a s dalšími méně častými příčinami [4, 5, 6, 10, 11, 12]. V dřívějších dobách, do 80. let minulého století, byly jako nejčastější příčiny závažných havárií (téměř polovina událostí) uváděny operační chyby, zejména procesní chyby, přetlaky, podtlaky nebo ztráta vakua v zařízení. Vliv lidského faktoru na vznik havárií byl uváděn až na druhém místě. Zde je patrný nezanedbatelný technický a technologický vývoj v chemickém průmyslu v posledních desetiletích i zásadní rozvoj v oblasti chemické bezpečnosti, kdy se tento typ závady podařilo vývojem částečně zredukovat [13, 14].

V rámci chemické bezpečnosti jsou identifikovány dva základní zdroje ohrožení, jedná se o stacionární a mobilní zdroje. Do skupiny stacionárních zdrojů ohrožení spadají technologická či procesní zařízení provozovaná v průmyslu, zejména pak v chemických a petrochemických závodech. Dále zařízení určená pro skladování nebezpečných chemických látek a směsí, případně pro jejich míchání, distribuci a další účely, například centrální tankoviště ropy a ropných produktů. V neprůmyslovém sektoru jsou stacionární zařízení používána například na sportovištích, zimních a plaveckých stadionech, ve chladírnách a mrazírnách potravin, velkých pivovarech, úpravnách vody nebo zdravotnických zařízeních, kde jsou používány technické a medicínální plyny nebo nejrůznější technologické kapaliny. Specifickými stacionárními zdroji jsou rovněž čerpací stanice, kde jsou mimo klasických pohonných hmot (nafta, benzín) skladovány také alternativní paliva (CNG, LNG, LPG, vodík). Z tohoto pohledu jsou stacionární zdroje ohrožení přítomné prakticky ve všech městech a větších aglomeracích [15, 16]. Objemy skladovaných nebezpečných látek se výrazně liší, a to i mezi zařízeními stejného typu v závislosti na používaných technologiích. Například množství amoniaku používaného na zimním stadionu se může pohybovat v závislosti na technologii chlazení a tvorby ledu hrací plochy v řádu stovek kilogramů až několika tun. V případě průmyslových zařízení se objemy chemických látek mohou pohybovat v řádu jednotek až desítek tun a v rámci rozsáhlých skladů až stovek tun. V tomto případě se jedná o objekty, které jsou v závislosti na objemu a typu skladovaných látek zařazeny do příslušné kategorie dle zákona o prevenci závažných havárií a mají zpracovanou příslušnou bezpečnostní dokumentaci. Při řešení mimořádných událostí v objektech

uvedeného typu je rovněž zasahujícím složkám integrovaného záchranného systému (dále jen IZS), zejména jednotkám požární ochrany, k dispozici doplňující dokumentace, dokumentace zdolávání požáru, havarijní karty a bezpečnostní listy jednotlivých chemických látek. Zásah v těchto objektech také bývá předmětem pravidelných cvičení [4, 11, 17, 18, 19]. V rámci stacionárních zdrojů ohrožení se nakládá s řadou nebezpečných chemických látek a směsí, jejich příklady jsou uvedeny v tabulce 1.

Tabulka 1: Vybrané nebezpečné chemické látky a směsi zastoupené v rámci stacionárních zdrojů ohrožení [15, 19, 20]

| Látka | Využití | Typ objektu |
|---------------------------|--|--|
| <i>Amoniak</i> | Chladicí médium, výroba dusíkatých látek, hnojiv, farmaceutických výrobků a herbicidů. Další využití v průmyslu. | Zimní stadiony, chladiřny a mrazírny, potravinářský průmysl, velké pivovary, chemické a petrochemické podniky, úpravny kovů. |
| <i>Chlor</i> | Úprava pitné vody, dezinfekční, čistící a bělicí prostředky, výroba plastů a PVC. | Úpravny pitné vody a chlorovací stanice, plavecké stadiony, chemické podniky. |
| <i>Benzín / nafta</i> | Pohonné palivo. | Čerpací stanice, petrochemické sklady a podniky. |
| <i>LPG a propan butan</i> | Pohonné palivo. | Čerpací stanice LPG, petrochemické sklady a podniky, sklady a prodejny plynů látek. |
| <i>Oxid siřičitý</i> | Výroba kyseliny sírové, dezinfekce a bělicí prostředky, redukční činidlo, konzervační látka. | Chemické podniky, potravinářství, zemědělství, výrobní papíru. |
| <i>Sirouhlík</i> | Výroba jiných chemických látek, kaučuku, celofánu, insekticid a rozpouštědlo. | Chemické podniky. |
| <i>Fosgen</i> | Výroba plastů, pesticidů, barev a chlorovaných derivátů v hutnictví. | Chemické podniky. |

Do mobilních zdrojů ohrožení řadíme veškeré způsoby přepravy nebezpečných látek, na které se vztahují mezinárodní dohody ADR, RID, IATA DRG, IMDG Code a ADN.

K samotné přepravě může být použito celé řady přepravních prostředků a obalů, cisterny, barely, tlakové lahve apod., které mají svá specifika a zásady manipulace i likvidace při havárii. Zásadní nebezpečí mobilních zdrojů ohrožení představuje možnost havárie prakticky kdekoli v rámci přepravní trasy, zejména v rozsáhlých aglomeracích [17]. Rizikem v tomto případě není pouze možnost přímého úniku látky, ale i sekundárního úniku z důvodu havárie transportního prostředku a jeho následného poškození [5]. Havárie tohoto typu mohou být obzvláště nebezpečné, protože k nim může dojít ve specifickém prostředí. V ČR se jedná zejména o silniční a železniční přepravu, která může havárii značně zkomplikovat a zhoršovat možnosti složek IZS při záchraně osob a provádění úkolů ochrany obyvatelstva. Konkrétně se jedná o již zmíněné aglomerace a hustě obydlené oblasti nebo oblasti s výskytem budov s vysokou koncentrací osob, špatně přístupný terén, mosty, tunely, soutěsky, podjezdy a nadjezdy, dálnice a podobné. Další nevýhodou spojenou s tímto typem ohrožení je absence či nemožnost řádného havarijního plánování, kdy je pro řešení události spoléháno zejména na místní složky IZS bez speciálního určení, a nikoliv na speciální, jak tomu může být v případě jednotky požární ochrany podniku. Zasahující složky musejí při identifikaci látek a jejich vlastností primárně spoléhat na označení přepravních prostředků a transportní dokumentaci, případně mohou k tomuto účelu využít speciálních databází chemických látek nebo expertní služby v systému TRINS [4, 21].

Dopady závažných havárií způsobených nebezpečnými chemickými látkami a směsmi lze blíže definovat ve třech hlavních kategoriích, na obyvatelstvo a zvířata, životní prostředí a ekonomiku. Pod dopady na obyvatelstvo lze uvažovat primárně újmu na životě a zdraví zasažených osob v areálu i mimo areál chemického zařízení, případně osob a zvířat v okolí místa vzniku havárie. Sekundárně se jedná o vznik negativního psychologického efektu na obyvatelstvo i zaměstnance podniku, nutnost evakuace, ztráta obživy apod. Dopady na životní prostředí lze rozdělit na kontaminaci vzduchu, povrchových či hlubokých vod a půdy, které je zapotřebí vzít v potaz při každé chemické havárii [22]. Dopady ekonomického charakteru vyjadřují škody na majetku, především při destrukčních projevech chemických havárií, finanční ztráty kvůli zastavení provozu podniku, vysoké náklady na odstranění dopadů havárie, zejména ekologických, případně zhoršení veřejného mínění o bezpečnosti podniku [4, 21, 23]. Obecné dopady havárií s výskytem látek CBRNE, jejich charakteristiku z pohledu rychlosti působení k rozvoji nežádoucích následků, rozsahu a četnosti, uvádí tabulka 2. Z uvedené tabulky vyplývá,

že chemické havárie lze řadit mezi události představující akutní ohrožení a závažné nebezpečí pro výše jmenované kategorie. V některých případech mohou ovšem chemické havárie představovat v závislosti na dané látce i dlouhodobý zdroj ohrožení, zejména při zasažení a akumulaci v životním prostředí, případně z pohledu zdravotních dopadů vyvolávat chronické intoxikace a dlouhodobé negativní dopady na organismus.

Tabulka 2: Dopady havárií s výskytem látek CBRNE [24]

| Typ události/látky | Rychlost rozvoje nežádoucích následků | Rozsah | Četnost |
|---------------------|---------------------------------------|-----------------------|-------------------|
| <i>Chemické</i> | Vteřiny až hodiny | Lokální až regionální | Vysoká |
| <i>Biologické</i> | Dny až týdny | Lokální až globální | Střední |
| <i>Radiologické</i> | Hodiny až dny | Lokální | Střední |
| <i>Nukleární</i> | Minuty až hodiny | Lokální až regionální | Velmi nízká |
| <i>Explozivní</i> | Okamžité | Lokální | Střední až vysoká |

3.1.2 Významné chemické havárie s únikem nebezpečných látek a směsí ve světě a v České republice

V novodobé historii se ve světě odehrála řada z pohledu chemické bezpečnosti významných havárií spojených s únikem nebezpečných chemických látek a směsí, které často měly závažné následky. Tyto události se vyznačují tím, že jsou velmi nebezpečné nejen pro obyvatelstvo, ale i zvířata a životní prostředí. Hlavním mezníkem v oblasti ochrany osob před účinky nebezpečných chemických látek a směsí byla jejich militarizace a použití ve formě bojových chemických látek v první světové válce. Dne 22. dubna 1915 byl v Belgii u města Ypres německými jednotkami poprvé použit chlor proti francouzským vojákům. Během této války byly chemické zbraně dále běžně využívány jako jeden z prostředků vedení boje. Tento fakt vedl k vytvoření prvních osobních ochranných prostředků a poukázal na nezbytnost individuální ochrany osob proti jejich účinkům [25]. Řada chemických látek, které byly využívány k bojovým účelům nebo jsou k tomuto účelu potencionálně zneužitelné, se nejen v rámci chemického průmyslu využívá dodnes a mohou být zdrojem ohrožení při chemických haváriích. V tomto kontextu hovoříme o nebezpečných chemických látkách a směsích.

Únik nebezpečných chemických látek a směsí ze stacionárního zařízení představuje v ČR reálnou hrozbu, která je zařazena mezi nepřijatelná rizika dle Analýzy hrozeb pro Českou republiku. Tato hrozba spadá primárně do gesce Ministerstva životního prostředí, ale v této oblasti také působí Ministerstvo vnitra a další subjekty [26]. Chemický průmysl může být i potencionálním terčem teroristických útoků, kdy lze cíleně poškodit zásobníky obsahující chemické látky a způsobit jejich nekontrolovaný únik. Takovýto útok může mít závažné dopady, především ve vztahu k obyvatelstvu, pokud bude jeho cílem zařízení v blízkosti rozsáhlých aglomerací, případně takzvané měkké cíle. Příkladem jsou přepravní prostředky určené k transportu těchto látek v rámci silniční či železniční přepravy, obchodní střediska, sportoviště a další převážně uzavřené objekty s možným výskytem velkého množství osob. Sekundárním cílem útoku je vznik paniky a psychologických následků, které mohou být nevyzpytatelné. Toto riziko ovšem nelze zcela eliminovat [27, 28].

Chemické havárie různého rozsahu jsou typem mimořádné události, které se ve světě odehrávají relativně často. Historicky především v druhé polovině 20. století, kdy docházelo k hlavnímu rozvoji chemického průmyslu ve světě. Mezi nimi bylo i několik havárií, které měly závažné následky a jako jeden z jejich dopadů začal být kladen celosvětový důraz na bezpečnost chemického průmyslu a na prevenci závažných havárií spojených s únikem nebezpečných chemických látek a směsí. Jako jednu z prvních významných havárií lze uvést havárii ve městě Flixborough ve Velké Británii, která se odehrála 1. června 1974. Tohoto dne došlo v továrně na výrobu nylonových vláken k úniku 30 tun cyklohexanu s následnou explozí v důsledku nevhodného technického řešení obtoku odstaveného reaktoru v kaskádě šesti reaktorů. Jako následek této havárie bylo 28 osob usmrceno, 36 vážně zraněno a v okolí továrny bylo poničeno téměř 2 000 budov [29].

Jako příklad významné havárie se závažnými následky v dopravě lze uvést nehodu automobilové cisterny v Houstonu v USA, která poukázala na závažnost chemických havárií v rámci přepravy nebezpečných chemických látek a směsí. Při této nehodě se automobilová cisterna, která převážela bezvodý amoniak, zřítla z dálničního nadjezdu a došlo k úniku 19 tun chemické látky. Havárie se odehrála 11. května 1976 a měla za následek 6 obětí, 78 hospitalizovaných osob a dalších 100 osob vyhledalo lékařskou pomoc. Všechny případy byly spojeny s inhalací nebo expozicí amoniaku [30].

Z pohledu chemické bezpečnosti v EU je nejvýznamnější událostí havárie v obci Seveso v severní Itálii, která se odehrála 10. července 1976. Její příčinou bylo přehřátí reaktoru na výrobu herbicidů chemického závodu společnosti ICMESA, což mělo za následek uvolnění přibližně 2 kilogramů látky TCDD neboli dioxinu, jednoho z nejprudších syntetických jedů. Dále došlo k uvolnění zhruba 500 kilogramů trichlorfenolu. Nekontrolovaný únik trval 20 minut a vytvořil jedovatý oblak o šířce 800 metrů a délce 5 kilometrů. Tato havárie se obešla bez obětí na životech, ale došlo k závažným ekologickým škodám a úhynu více než 3 000 zvířat. Evakuace obyvatelstva byla zahájena až po 14 dnech od úniku, když se u lidí a zvířat začaly objevovat příznaky intoxikace. Vedení společnosti prvotně označilo tento únik za běžnou havárii a její závažnost priznalo až po nátlaku veřejnosti a místních úřadů [13].

Za nejzávažnější chemickou havárii v historii lze považovat havárii v Bhópálu v Indii, která se odehrála v noci z 2. na 3. prosince 1984 v chemickém podniku na výrobu pesticidů americké společnosti Union Carbide. Při této havárii došlo k úniku 40 metrů křichlových methyloisokyanátu ze zásobníku, do kterého vnikla voda, což mělo za následek vznik silné exotermní reakce a prasknutí bezpečnostního ventilu. Přibližně mezi 20 a 30 tunami jedovatého plynu se posléze rozšířilo do okolí podniku, které bylo hustě obydlené. Následkem této havárie zemřelo přibližně 2 000 osob a 200 000 bylo zasaženo, z čehož mělo až 80 000 osob těžké příznaky intoxikace. Počet úmrtí, včetně latentních případů, se dle různých zdrojů odhaduje v zasažené oblasti až na 8 000. Tato havárie byla spojena se závažným porušováním a nedodržováním bezpečnostních předpisů v podniku a stanovenými nízkými bezpečnostními standardy [13, 28]. Zejména havárie v Sevesu a Bhópálu vedly ke vzniku evropské direktivy SEVESO I ohledně prevence závažných havárií, která byla zaměřena na zvýšení bezpečnosti provozu chemických továren a podniků.

Jako další příklad závažné havárie ve světě lze uvést požár s následnou explozí ve společnosti S.E. Fireworks ve městě Enschede v Holandsku, která se odehrála 13. května 2000. Při této havárii došlo k explozi 177 tun pyrotechniky a jako následek si vyžádala 22 obětí, 974 zraněných osob a poškození více než 15 000 budov v okolí [31]. Na základě této havárie byly v rámci direktivy Evropské unie SEVESO II zahrnuty i výbušné a explozivní látky.

K chemickým haváriím docházelo v chemickém průmyslu i na území České republiky, potažmo Československa, který je na našem území značně rozvinutý. V posledních dekádách lze jako příklad uvést únik koncentrované kyseliny sírové, který se stal dne 4. března 1996 v areálu farmaceuticko-chemické společnosti Farmak a.s. v Olomouci. K úniku došlo při přečerpávání kyseliny z železniční cisterny, kdy došlo k rozpojení přečerpávacího zařízení a úniku téměř 8,8 tun chemické látky. Dopady únik byly spojeny s nefunkčním zařízením na měření pH v kanalizaci, do které kyselina unikla, a nepřítomností obsluhy přečerpávacího zařízení u cisterny. Jako následek úniku došlo k vytvoření sirovodíku v kanalizaci a úmrtí dvou osob, které se jej nadýchaly [32, 33].

Dalším případem úniku nebezpečných chemických látek a směsí z chemického podniku je únik chloru ze Spolany Neratovice, který se odehrál 21. července 2000. V tomto podniku došlo v jeho historii k řadě havárií spojených s únikem nebezpečných látek, které se v něm využívají nebo historicky využívaly. V tomto případě došlo k technické závadě na zásobníku a následném úniku 188 kilogramů chloru do okolí. Při likvidaci úniku bylo zraněno 7 hasičů [34]. Jako další případ chemické havárie v tomto podniku lze uvést událost, která nastala při povodních v srpnu roku 2002. Při této události došlo vlivem povodní k úniku 81 tun chloru ze zásobníku, z čehož převážná většina unikla do vody a přibližně 760 kg do ovzduší. V důsledku povodní unikly v podniku i další látky ve značném množství, například těžký topný olej (30,5 tun), síran amonný (2 380 tun), kyselina sírová (10,6 tun) a dichlorethan (50 kg) [35].

Významným zdrojem ohrožení na našem území jsou nejen chemické podniky, ale i jiná zařízení, která ke svému provozu využívají a skladují nebezpečné chemické látky a směsi, například zimní či plavecké stadiony. Jako příklad havárie v této oblasti lze uvést únik amoniaku ze zimního stadionu ve Znojmě, který se odehrál 28. května 2007. Tuto havárii zapříčinilo vadné těsnění u zásobníku, který obsahoval 5 tun chemické látky. Celkem uniklo 1,5 kilogramu amoniaku [36].

3.2 Právní předpisy a normy vymezující oblast prevence závažných havárií na úrovni Evropské unie a České republiky

3.2.1 Evropské předpisy a direktiva SEVESO

Hlavní předpis, který je spojený s prevencí závažných havárií na území Evropské unie, představuje direktiva SEVESO. Direktiva SEVESO I, směrnice Rady 82/501/EEC, byla přijata 24. června 1982 na základě havárie v Sevesu, Bhópálu a dalších. Tato směrnice byla zaměřena na prevenci a kontrolu havárií v chemickém průmyslu. Byla v ní ustanovena provozovatelům chemických podniků ohlašovací povinnost, povinnost zpracování bezpečnostní zprávy, havarijního plánu podniku a povinnost poskytování informací orgánům působícím v oblasti závažných průmyslových havárií [37]. K její aktualizaci došlo 9. prosince 1996, kdy byla přijata direktiva SEVESO II, směrnice Rady 96/82/EC ohledně kontroly závažných havárií zahrnující nebezpečné látky. Tato směrnice upravovala seznam nebezpečných látek a jejich kategorie, včetně později přidaných výbušných a explozivních látek. Dále stanovila povinnost zřízení bezpečnostního managementu v chemickém průmyslu [38]. Direktiva SEVESO II byla do českých právních norem implementována zákonem č. 353/1999 Sb., o prevenci závažných havárií (zkrácený název). Následně byla její aktualizace implementována zákonem č. 59/2006 Sb. Poslední direktiva, směrnice Evropského parlamentu a Rady (ES) 2012/18/EU, SEVESO III, byla přijata 4. července 2012 v návaznosti na přijetí nové klasifikace nebezpečných látek dle nařízení ES č. 1272/2008 (CLP – Classification, Labelling and Packaging of substances and mixtures) v platném znění a zaměřuje se na omezení dopadů chemických havárií na člověka a zajištění přístupu obyvatelstva k informacím [39, 40]. Tato direktiva byla v České republice implementována současným zákonem o prevenci závažných havárií, zákon č. 224/2015 Sb. Nařízení CLP dále definuje způsob označování chemických látek na obalech, přičemž vychází z globálně harmonizovaného systému (GHS) a stanovuje standardizované H věty pro označení nebezpečnosti dané chemické látky nebo směsi a P věty pro bezpečnostní pokyny při zacházení s látkou. V rámci prevence závažných havárií jsou mimo nařízení CLP důležité i nařízení ES č. 1907/2006 (REACH) o registraci, hodnocení, povolování a omezování chemických látek v platném znění a mezinárodní přepravní dohody ADR, RID, IATA DRG, IMDG Code a ADN, které stanovují podmínky přepravy nebezpečných věcí v rámci silniční, železniční, letecké, námořní a vnitrozemní vodní přepravy. Tyto dohody

blíže určují způsob označení dopravního prostředku, který převáží nebezpečné věci, případně označení jednotlivých přepravních obalů [15].

3.2.2 Právní vymezení chemické bezpečnosti v České republice

V České republice je oblast ochrany před chemickými haváriemi stanovena zákonem č. 224/2015 Sb., o prevenci závažných havárií způsobených vybranými nebezpečnými chemickými látkami nebo chemickými směsmi a o změně zákona č. 634/2004 Sb., o správních poplatcích, ve znění pozdějších předpisů (zákon o prevenci závažných havárií). Tento zákon definuje systém prevence závažných havárií způsobených vybranými nebezpečnými chemickými látkami a směsmi v rámci objektů, ve kterých jsou tyto látky umístěny. Jedná se o objekty spadající do chemického průmyslu či skladovací zařízení, kde lze předpokládat výskyt většího množství chemických látek. Dále se jedná například o sportovní, výrobní či jiná zařízení, která ke svému provozu tyto látky používají a za tímto účelem je v určitém množství skladují. Tento zákon dále využívá nový způsob klasifikace nebezpečných chemických látek a směsí, včetně kategorizace jejich nebezpečnosti, v souladu s nařízením CLP. Cílem zákona je snížit pravděpodobnost vzniku potenciální havárie a minimalizovat její dopady na obyvatelstvo, zvířata, životní prostředí a majetek. Nedílnou součástí prevence závažných havárií je havarijní plánování, které představuje komplexní proces přípravy, postupů a vazeb realizovaných orgány státní správy a samosprávy, právníckými a podnikajícími fyzickými osobami s cílem zajištění územní připravenosti na potenciální havárie v oblasti chemického průmyslu. Zaměřuje se zejména na analýzu potenciálních hrozeb a jejich dopadů, minimalizaci vzniku havárie, možných následků a stanovení příslušných opatření. K tomuto účelu slouží zejména havarijní plány, které jsou zpracovávány na úrovni kraje a samotného podniku a jsou základní dokumentací IZS [3, 41].

Na základě množství skladovaných chemických látek jsou dle zákona o prevenci závažných havárií stanoveny povinnosti provozovatelů těchto zařízení ve vztahu k zajištění bezpečnosti objektu a celkové připravenosti na řešení potenciálních havárií. Z tohoto pohledu je podstatné zařazení objektu do kategorie A nebo B, případně jeho nezařazení, dle konkrétního množství a typu skladovaných látek. Toto množství je individuálně určeno pro vybrané konkrétní látky nebo je stanoveno dle příslušné kategorie nebezpečnosti látek. Uvedené dělení objektů přímo odpovídá direktivě

Evropského parlamentu a Rady SEVESO III, které objekty dělí do kategorií Upper nebo Lower Tier establishment. Pokud je v areálu objektu nebezpečná látka skladována na více místech nebo je zde skladováno více látek, použije se součet poměrného množství nebezpečných látek pro zjištění, zdali se ustanovení zákona o prevenci závažných havárií bude na dotčený objekt vztahovat [3]. Poměrný součet je proveden dle uvedeného vzorce:

$$N = \sum_{i=1}^n \frac{q_i}{Q_i}$$

- N = ukazatel vyjadřující součet poměrného množství, ustanovení zákona se uplatňuje, pokud je hodnota rovna nebo větší než 1;
- n = počet nebezpečných látek;
- q_i = množství nebezpečné látky;
- Q_i = příslušné množství nebezpečné látky i uváděné v tabulce I nebo II přílohy zákona o prevenci závažných havárií [3].

Na základě těchto údajů je provozovatel povinen zpracovat buď protokol o nezařazení nebo návrh na zařazení do jedné ze skupin. Veškerá dokumentace, kterou mají provozovatelé těchto objektů vypracovat, se předkládá příslušnému krajskému úřadu a některá navíc Hasičskému záchrannému sboru (HZS) kraje. Na základě zařazení do jedné z uvedených skupin vzniká provozovateli povinnost zpracovat příslušnou bezpečnostní dokumentaci. Provozovatelé objektů zařazených do skupin A i B provádí posouzení rizik závažné havárie, na jejímž základě zpracovávají další bezpečnostní dokumentaci či se podílejí na jejím zpracování. Provozovatel objektu zařazeného do skupiny B dále zpracovává vnitřní havarijní plán a předkládá krajskému úřadu a HZS kraje veškeré nezbytné dokumenty a podklady pro zpracování vnějšího havarijního plánu a stanovení zóny havarijního plánování. Zóna havarijního plánování představuje území v okolí objektu, pro které je zpracováván vnější havarijní plán a ve kterém je plánováno provádění úkolů ochrany obyvatelstva v případě vzniku havárie. Vnější havarijní plán uvádí identifikaci a činnost provozovatele zařízení, charakteristiku okolního území, určení zdrojů rizik a posouzení rizik. Dále je v něm vymezena zóna havarijního plánování a informace o potencionálním úniku nebezpečných látek, včetně jejich popisu a stanovení možných dopadů havárie dle jednotlivých scénářů. Následně uvádí přehled připravených opatření k řešení havárie, popisuje způsob jejich realizace a v poslední části stanovuje

plány konkrétních činností, které jsou určeny k minimalizaci dopadů havárie. Vnější havarijní plán je prověřován z hlediska jeho aktuálnosti minimálně jednou za 3 roky. Tento plán zpracovává HZS kraje v rámci přenesené působnosti krajského úřadu a schvaluje jej hejtman kraje. Provozovatelé zařízení do skupiny B dále zpracovávají bezpečnostní program a plán fyzické ochrany objektu [3, 41, 42].

Zařízení zařazené do skupiny A zpracovávají bezpečnostní program a plán fyzické ochrany. Zákon o prevenci závažných havárií dále ukládá provozovatelům zařízení informační povinnost o vzniku havárie, stanovuje působnost orgánů veřejné správy v dotčené oblasti, vymezuje způsob provedení kontrol a definuje přestupky plynoucí z jeho porušení. Výkon státní správy a působnost ústředních správních úřadů v oblasti chemické bezpečnosti zajišťují zejména Ministerstvo životního prostředí, Ministerstvo vnitra a částečně také Státní úřad pro jadernou bezpečnost. V rámci místní samosprávy mají hlavní roli krajské úřady, jejich orgány a HZS kraje. Mezi významné instituce působící v této oblasti patří také například Státní ústav jaderné, chemické a biologické ochrany, v.v.i., který je zřizován Státním úřadem pro jadernou bezpečnost, či Státní zdravotní ústav, Krajská inspekce životního prostředí a další [3, 15, 43].

Bezpečnostní opatření v rámci fyzické ochrany objektu pro skupinu A i B blíže upravuje vyhláška Ministerstva průmyslu a obchodu č. 225/2015 Sb., o stanovení rozsahu bezpečnostních opatření fyzické ochrany objektu zařazeného do skupiny A anebo skupiny B [43]. Bližší podrobnosti ohledně bezpečnostní dokumentace, plánu kontrol a informovanosti, včetně způsobu zpracování informací pro veřejnost, stanovují doplňující vyhlášky Ministerstva vnitra a Ministerstva životního prostředí. Zejména vyhláška č. 227/2015 Sb., o náležitostech bezpečnostní dokumentace a rozsahu informací poskytovaných zpracovateli posudku. V oblasti prevence závažných havárií a chemické bezpečnosti jsou dále účinné vyhlášky Ministerstva životního prostředí č. 228/2015 Sb., o rozsahu zpracování informace veřejnosti, hlášení o vzniku závažné havárie a konečné zprávy o vzniku a dopadech závažné havárie, a vyhláška č. 229/2015 Sb., o způsobu zpracování návrhu ročního plánu kontrol a náležitostech obsahu informace o výsledku kontroly a zpráv o kontrole [15].

Zákon o prevenci závažných havárií doplňuje vyhláška Ministerstva vnitra č. 226/2015 Sb., o zásadách pro vymezení zóny havarijního plánování a postupu při jejím vymezení a o náležitostech obsahu vnějšího havarijního plánu a jeho struktuře, v upraveném znění dle vyhlášky č. 311/2021 Sb. Tato vyhláška zahrnuje Evropskou direktivu SEVESO III v oblasti zásad vymezení zóny havarijního plánování a upravuje náležitosti obsahu vnějšího havarijního plánu. Pro účel stanovení zóny havarijního plánování jsou ve vyhlášce charakterizovány havarijní projevy jednotlivých chemických látek ve formě typových scénářů. Následně je zde vyjádřen parametr předběžné vzdálenosti zóny havarijního plánování od zdroje nebezpečné látky v závislosti na množství látky dle jednotlivých scénářů. Tento parametr je následně modifikován dle určených faktorů k získání výsledné hodnoty [42].

Dalším důležitým zákonem v oblasti nebezpečných chemických látek a směsí je zákon č. 350/2011 Sb., o chemických látkách a chemických směsích a o změně některých zákonů, ve znění pozdějších předpisů (chemický zákon), který navazuje zejména na Evropské nařízení CLP, REACH a určuje kategorie nebezpečnosti látek v závislosti na jejich koncentraci. Chemický zákon dále stanovuje výkon státní správy v této oblasti, nápravná opatření a přestupky proti tomuto zákonu [44].

Zákon č. 239/2000 Sb., o integrovaném záchranném systému a o změně některých zákonů, ve znění pozdějších předpisů, ukládá složkám IZS povinnost zajištění zásahu, realizace záchranných a likvidačních prací v místě mimořádné události a podílení se na provedení úkolů ochrany obyvatelstva. Dále ukládá HZS kraje úkoly, které plní ve prospěch krajského úřadu a úřadu obce s rozšířenou působností, včetně vypracování havarijního plánu kraje a vnějšího havarijního plánu. V tomto zákoně jsou následně stanoveny povinnosti právnických, podnikajících fyzických a fyzických osob při řešení havárií s výskytem nebezpečných chemických látek a směsí [45]. Vyhláška Ministerstva vnitra č. 328/2001 Sb., o některých podrobnostech zabezpečení integrovaného záchranného systému, ve znění pozdějších předpisů, deklaruje, že pro objekty a zařízení, u kterých hrozí možnost vzniku závažné havárie způsobené nebezpečnými chemickými látkami a směsmi, se zpracovává vnější havarijní plán. Nicméně tato vyhláška se v oblasti havarijního plánování zaměřuje na jaderná zařízení a pracoviště s významnými zdroji ionizujícího záření [46].

Z pohledu určení významnosti chemické bezpečnosti v České republice jsou podstatné i další dokumenty nelegislativního charakteru, které identifikují chemická ohrožení jako vážná a blíže se věnují jejich podstatě a nutnosti ochrany před nimi. Jedná se zejména o Analýzu hrozeb pro Českou republiku z roku 2015, jejíž zpracovatelem je HZS ČR. Dále se jedná o Audit národní bezpečnosti z roku 2016 zpracovaný v rámci Ministerstva vnitra. Na základě těchto dokumentů jsou identifikované hrozby z kategorie látek CBRNE, které mohou na našem území nastat a které jsou následně rozpracovány do příslušných typových plánů. Z oblasti chemické bezpečnosti se jedná o únik nebezpečných chemických látek ze stacionárního zařízení, typový plán č. 14 [26, 27]. V uvedených dokumentech ovšem absentuje identifikace a evaluace chemické havárie při úniku nebezpečné látky z mobilního zdroje ohrožení. Tento typ události je sice obecně méně nebezpečný než únik ze stacionárního zdroje, ale historické události a četnost úniku nebezpečných chemických látek a směsí z mobilních zdrojů ukazují, že toto ohrožení nelze podceňovat. Mezi dokumenty, které blíže stanovují připravenost na chemické havárie, patří zejména Ústřední poplachový plán IZS, který určuje speciální síly a prostředky řazené do příslušných odřadů dle jejich specifického zaměření [47]. Bližším postupům řešení chemických havárií se věnují již zmiňované havarijní karty, dokumentace zdolávání požárů, bezpečnostní listy a obecné postupy vycházející z Řádu chemické služby HZS ČR. Tento řád blíže vymezuje minimální vzdálenost hranice nebezpečné zóny od nebezpečné látky, kterou určuje pro jedovaté, žíravé plyny a páry na 15 m, těkavé látky na 30 m, neznámé látky na 100 m a pro rozsáhlá oblaka par na 100 m [48]. Chemickým událostem ve specifických podmínkách se také věnují typové činnosti složek IZS při společném zásahu, zejména typová činnost IZS č. 13 – Reakce na chemický útok v metru, částečně typová činnost IZS č. 9 – Zásah složek IZS u mimořádné události s velkým počtem zraněných osob a typová činnost IZS č. 1 – Špinavá bomba či okrajově některé další.

3.3 Vlastnosti, projevy a šíření nebezpečných chemických látek, směsí a těžkých plynů v prostředí

Nebezpečné chemické látky a směsi představují látky, které přímo podléhají klasifikaci CLP dle příslušného nařízení Evropské unie a mají jednu nebo více nebezpečných vlastností. Případně se jedná o konkrétní látky, které jsou v příslušném objektu nebo zařízení skladovány či využívány a spadají do seznamu nebezpečných látek dle zákona o prevenci závažných havárií. Nebezpečné látky lze obecně dělit do kategorií chemické, biologické, radiologické, nukleární a explozivní (CBRNE) [3, 15]. Klasifikace nebezpečných chemických látek a směsí je způsob vyjádření jejich společných vlastností či nebezpečných projevů. Látky lze klasifikovat pomocí celé řady systémů, které se odvíjejí od jednotlivých disciplinárních přístupů, například dle jejich fyzikálně chemických vlastností, toxikologických účinků na živé organismy a další. Klasifikace nebezpečných chemických látek a směsí je obecně stanovena v rámci zemí Organizace spojených národů dle systému GHS. V chemické bezpečnosti v Evropské unii je tento systém implementován nařízením CLP. Tato klasifikace je rovněž zahrnuta v zákoně č. 224/2015 Sb., o prevenci závažných havárií [49, 50]. V souladu s klasifikací CLP rozdělujeme nebezpečné chemické látky a směsi do uvedených tříd nebezpečnosti:

- látky nebezpečné pro zdraví (toxické látky – skupiny H1 až H3);
- fyzikálně nebezpečné látky:
 - výbušniny – skupina P1;
 - hořlavé plyny a aerosoly – skupiny P2 a P3;
 - oxidující plyny – skupina P4;
 - hořlavé kapaliny – skupina P5;
 - samovolně reagující látky a směsi a organické peroxidy – skupina P6;
 - samozápalné kapaliny a tuhé látky – skupina P7;
 - oxidující kapaliny a tuhé látky – skupina P8;
- látky nebezpečné pro životní prostředí (látky nebezpečné pro vodní prostředí – skupiny E1 a E2);
- látky představující jiný druh nebezpečí (skupiny O 1 až O3) [3].

Dle Dohody o mezinárodní silniční přepravě nebezpečných věcí se látky rozdělují do devíti tříd (ADR):

1. výbušné látky a předměty;
2. plyny;
3. hořlavé kapaliny;
- 4.1 hořlavé tuhé látky, samovolně se rozkládající látky a znečlivělé výbušniny;
- 4.2 samozápalné látky;
- 4.3 látky, které ve styku s vodou vytvářejí hořlavé plyny;
- 5.1 látky podporující hoření;
- 5.2 organické peroxidy;
- 6.1 toxické látky;
- 6.2 infekční látky;
7. radioaktivní látky;
8. žíravé látky;
9. jiné nebezpečné látky a předměty [51].

Dle přílohy č. 1 zákona č. 350/2011 Sb., o chemických látkách a chemických směsích a o změně některých zákonů, ve znění pozdějších předpisů, se jedná o látky vysoce toxické, toxické, karcinogenní v různých kategoriích, mutagenní v různých kategoriích, toxické pro reprodukci v různých kategoriích, zdraví škodlivé, žíravé, dráždivé, senzibilizující, nebezpečné pro životní prostředí a nebezpečné pro ozónovou vrstvu Země [44].

Obecně jsou vlastnosti a projevy chemických látek definovány jejich fyzikálními a chemickými vlastnostmi. Jejich projevy při úniku jsou také dány jejich těkavostí, kdy při úniku může dojít k šíření toxické látky v prostředí, zahoření či explozi [15]. Tyto projevy jsou dále ovlivněny vnějšími faktory, zejména meteorologickými podmínkami a charakteristikou okolní krajiny. Chemické vlastnosti látky také blíže definují její účinky na živé organismy, přičemž úroveň účinku je dána koncentrací látky působící na organismus a dobou kontaminace [19]. Touto problematikou se blíže zabývá vědní obor toxikologie.

Mezi základní fyzikálně chemické vlastnosti látek patří zejména:

- *Relativní molekulová hmotnost* vychází z chemického složení látky a průměrné hmotnosti jednotlivých částic. Na základě této hodnoty lze predikovat hustotu látky a částečně její skupenství v určitých podmínkách či chování látky při úniku v atmosféře.
- *Bod tání, tuhnutí a varu* přesně stanovují, v jakém skupenství se budou látky nacházet při určitých teplotách. Na tyto hodnoty má vliv i okolní atmosférický tlak. Na základě těchto hodnot lze predikovat chování a stálost látek v prostředí při jejich úniku.
- *Hustota látky* vyjadřuje hmotnost určitého objemu látky v pevném či kapalném skupenství a částečně ovlivňuje její chování při disperzi a šíření aerosolu.
- *Relativní hustota par* je veličina, která stanovuje poměr hustoty plynné chemické látky a hustoty okolního vzduchu. Na základě této veličiny lze predikovat perzistenci látky v přízemní vrstvě atmosféry.
- *Maximální koncentrace* či výparnost udává nejvyšší možnou hodnotu koncentrace látky na základě jejího objemu, ve které se mohou její plyny a páry v prostředí nacházet.
- *Tlak nasycených par* udává maximální tlak plynné fáze látky nad kapalnou fází při určité teplotě, kdy jsou tyto fáze v rovnováze. Tato hodnota také souvisí s maximální koncentrací par.
- *Reaktivnost látky* udává afinitu látky k vytvoření chemické reakce při kontaktu s jinými látkami a tvorbě produktů chemické reakce. Znalost reaktivnosti látek zejména s vodou je v chemické bezpečnosti zásadní při likvidaci chemických havárií.
- *Výbušnost a hořlavost látky* vychází z její těkavosti a koncentrace v daném prostředí, kdy při překročení kritické teploty může dojít za určitých tepelných podmínek ke vzplanutí látky [4, 19, 28].

Dopady chemických havárií na obyvatelstvo je nezbytné zkoumat i z toxikologického hlediska, jelikož při známosti unikající látky, jejím fyzikálním a chemickým vlastnostem, expoziční době a koncentraci lze predikovat potencionální zdravotní dopady na zasažené osoby. Toxicitu látky pro živé organismy blíže udává její chemická struktura, rozpustnost ve vodě a tucích, viskozita, povrchové napětí, teplota rozkladu, difusní koeficient,

schopnost oxidace a další. Toxické vlastnosti látky dále závisejí na bráně vstupu do organismu, systémové a látkové specifitě, typu účinku na organismus a biologických faktorech zasažené osoby. Toxicita látky je také přímo závislá na absorbované dávce, době působení a její schopnosti vyvolat nežádoucí účinek v organismu. Tyto účinky mohou být přímé, biochemické, imunotoxické, mutagenní, karcinogenní či teratogenní. Účinky rovněž závisejí na osudu látky organismu, procesu absorpce, distribuce, biotransformace a následné formě exkrece. Pro vyjádření toxicity jednotlivých látek a schopnost vyvolat toxický účinek na organismus se využívají hodnoty stanovující toxickou dávku či toxickou koncentraci. Nejužívanější jsou hodnoty, které dokáží vyvolat toxický účinek u 50 % exponovaných organismů. Jedná se o prahovou, účinnou, zneschopňující a smrtící dávku či koncentraci. K vyjádření koncentrace látky, která bezprostředně ohrožuje životy a zdraví osob, se používá toxikologický ukazatel IDLH [4, 16, 18, 19, 25, 28].

Hořlavost je typickým projevem pro určité látky a skupiny látek, převážně kapalin. Tento projev je blíže závislý na typu dané látky a její vlastní hořlavosti, těkavosti, objemu a iniciační teplotě či mechanismu tvorby tepla a energie. Nebezpečné účinky hoření chemických látek představují primárně tepelné záření, jehož nebezpečnost je dána i dobou působení na organismus. Sekundárně se jedná o tvorbu toxických zplodin hoření, možnost šíření požáru, exploze, poškození staveb a další. Jelikož je hoření oxidační reakcí, je pro něj nezbytnost oxidačního činidla. Nejčastěji se jedná o vzdušný kyslík, ovšem řada látek může oxidovat při současném vývinu tepla i při exotermní reakci s jinými látkami. Hořlavé látky lze dle nezbytného tepla k vznícení dělit do příslušných tříd nebezpečnosti reprezentující míru hořlavosti. Některé látky dokonce za určitých podmínek a teplot dosahují samovznícení. Hořlavé účinky jsou charakteristické zejména pro ropné produkty a organické těkavé látky, ale také například pro kyanovodík, fosfor, oxidy dusíku, plasty a další [4, 16].

Výbušnost látek je přímo závislá na jejich těkavosti a úrovni koncentrace látky v daném prostředí. Výbušnost látek je taktéž částečně dána jejich hořlavostí a je charakteristická zejména pro jejich plyny, páry a aerosoly. Za určitých podmínek jsou výbušné i nejrůznější prachy. Výbuch látek představuje charakteristické nebezpečí primárně v důsledku působení tepelného záření a tlakové vlny. Sekundárně v důsledku možné tvorby úlomků a šrapnelů ze skladovací nádoby, možného vzniku následného

požáru nebo poškození či destrukce budov. Za určitých podmínek může nepřímo explodovat i látka, která není standardně hořlavá nebo těkavá, a to v případě, že se jedná o látku skladovanou v uzavřené tlakové nádobě. Pokud dojde k výraznému zvýšení teploty látky uvnitř zásobníku, například vnějším požárem, dojde eventuálně k varu a odpařování látky uvnitř zásobníku, čímž se zvýší interní tlak a následně může dojít k explozi. Koncentrace látky, při níž může dojít k její explozi, je stanovena dolní a horní mezí výbušnosti, LEL (Lower Explosive Limit) a UEL (Upper Explosive Limit) [4, 16]. Přehled vybraných, v průmyslu zastoupených nebezpečných chemických látek a směsí s vyjádřením jejich nebezpečnosti, je uveden v tabulce 3.

Tabulka 3: Přehled vybraných nebezpečných chemických látek a směsí s vyjádřením jejich nebezpečnosti [15, 19, 52, 53]

| Látka | Nebezpečné vlastnosti | Vyjádření nebezpečnosti | Molekulová hm./bod varu |
|----------------|--|---|-------------------------------------|
| <i>Amoniak</i> | Vysoce nebezpečný plyn se čpavým zápachem, způsobuje poleptání kůže, dráždění sliznic, látka vysoce toxická pro organismus. | IDLH 300 ppm, 16 % LEL, 25 % UEL | 17,03/ -33 °C |
| <i>Chlor</i> | Vysoce nebezpečný žlutozelený plyn, silně dráždící dýchací cesty a sliznice, látka vysoce toxická pro organismus, silně korozivní. | IDLH 10 ppm | 70.91/ -34 °C |
| <i>Benzín</i> | Vysoce hořlavá kapalina se vznětlivými a dráždivými výpary. | 1,4 % LEL, 7,4 % UEL, vzplanutí při - 38 °C | 72/ 60-200 °C |
| <i>Nafta</i> | Hořlavá kapalina se vznětlivými a dráždivými výpary. | 1,3 % LEL, 6 % UEL, vzplanutí při 52 °C | 280-340 °C |
| <i>LPG</i> | Vysoce hořlavý a dusivý plyn, směs propanu a butanu v proměnném poměru 60:40. | IDLH 2000 ppm, 2,2 % LEL, 9,5 % UEL, vzplanutí při - 104 °C | Více než 44/ Více než - 40 °C |

| | | | |
|----------------------|---|---|-------------------|
| <i>Oxid siričitý</i> | Vysoce toxický plyn při vdechnutí, způsobuje poleptání kůže, sliznic a poškození očí. | IDLH 100 ppm | 64,07/ -10 °C |
| <i>Sirouhlik</i> | Vysoce hořlavá kapalina s toxickými a dráždivými výpary. | IDLH 500 ppm, 1 % LEL, 50 % UEL, vzplanutí při - 30 °C | 76,13/ 46,5 °C |
| <i>Fosgen</i> | Extrémně toxický plyn se zápachem po čerstvém senu, dráždivé účinky především na dýchací cesty. | IDLH 2 ppm | 98,92/ 8,3 °C |

3.3.1 Charakteristika šíření těžkých plynů v prostředí

Těžký plyn je označení pro plyn, který má vyšší molární hmotnost než vzduch, případně se nachází ve stavu s vyšší hustotou než okolní vzduch. Jedná se primárně o látky, které se v chemickém průmyslu běžně skladují v plynném stavu nebo jsou zkapalněny pomocí aplikace fyzikálních principů [54]. Molární hmotnost vzduchu a hustota vzduchu za normálních podmínek je uvedena níže: [55, 56]

$$28,96 \text{ g/mol}$$

$$1,29 \text{ kg/m}^3$$

Při úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu lze charakterizovat jejich rozptyl ve třech fázích. V první fázi, během úniku, plyn klesá k zemi v důsledku působení gravitace. V této fázi má unikající plyn největší hustotu a koncentraci, které dle působení teplotního rozdílu látky a okolního prostředí způsobují formování oblaku těžkého plynu i u látek lehčích vzduchu, například amoniaku. V této fázi se u dvoufázového úniku či úniku typu JET mohou uplatňovat i jevy, jakými jsou například tzv. Joule-Thomsonův jev nebo valivý efekt šíření oblaku těžkého plynu ve směru osy zdroje úniku. Oblak se tedy v první fázi může šířit aktivním mechanismem i proti působení externích, zejména meteorologických faktorů, ale i gravitačních podmínek a uplatňuje se přenos a působení kinetické energie látky získané při jejím úniku v závislosti na podmínkách úniku samotného. Následně se těžký plyn v druhé fázi začíná šířit po povrchu země a postupně mísit a ředit okolním vzduchem. V této fázi se také začínají uplatňovat difusní a externí jevy na jeho šíření jako jsou depozice či sedimentace

v důsledku působení gravitačních sil, aktivní promíchávání s okolním vzduchem v důsledku turbulentního proudění vzduchu a další. Ve třetí fázi nastává úplné naředění těžkého plynu vzduchem, čímž dochází k jeho kompletní disperzi. Ve všech fázích je plyn rovněž zahříván od zemského povrchu a postupně se snižuje jeho relativní hustota. Rozptyl a šíření těžkého plynu jsou v uvedených fázích významně ovlivněny meteorologickými podmínkami a rozdílem teplot látky a okolního prostředí. Doba trvání jednotlivých fází výrazně závisí také na vlastnostech látky, její koncentraci a způsobu tvorby těžkého plynu, jestli se jedná o únik vroucí kapaliny s okamžitým odparem nebo pozvolným odparem kapaliny z kaluže. Obecně mívají první dvě fáze delší trvání při menších únicích a tvorbě nižší koncentrace látky v prostředí než při masivních únicích z důvodu působení nižší úrovně energie na látku i okolí plynoucí z mechaniky úniku a teplotního rozdílu [14, 54, 56, 57, 58, 59]. Při dostatečně velkém a rychlém úniku bude unikající látka vytvářet okem viditelná a ohraničená oblaka aerosolu a těžkého plynu, zejména pokud je hustota oblaku minimálně o 1 % vyšší než hustota okolního vzduchu [60, 61]. Šíření těžkého plynu v první a druhé fázi s patrnými shluky a oblaky těžkého plynu je znázorněno pro různé látky na obrázcích 1 a 2.



Obrázek 1: Ukázka šíření těžkého plynu, chloru, v experimentálním prostředí s patrnou první a druhou fází [62]



Obrázek 2: Ukázka šíření těžkého plynu, oxidu uhličitého, při úniku typu JET a tvorba viditelných oblak o vysoké koncentraci u v běžných podmínkách nepozorovatelné látky [60]

3.4 Modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí

Modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí představuje proces predikce jejich šíření v prostředí na základě matematických modelů. Tento proces má široké využití, především v oblasti havarijní připravenosti a plánování, kde slouží k doplnění analýz rizik a bezpečnostní dokumentace. Modelace jsou jeden z nástrojů, které se využívají při stanovení scénářů a určení dopadů možných chemických havárií, které jsou součástí vnitřních i vnějších havarijních plánů. Rovněž v současnosti slouží při optimalizaci stanovení zóny havarijního plánování. V určité míře jsou využitelné i při samotném úniku nebezpečných látek pro poskytování informační podpory veliteli zásahu o možném rozsahu havárie s cílem dosáhnout kvalitnějších a fundovanějších rozhodnutí. K tomuto účelu se v dnešní době používají modelační softwarové nástroje [4, 11]. Modelace se zaměřují především na predikci šíření a rozptylu těžkých plynů v okolí havárie. Lze ale modelovat i únik kapalných chemických látek a směsí, včetně

havarijních projevů spojených s jejich odpařováním, hořením a explozí. Využívány jsou zejména modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve vnějším prostředí, které jsou přímo využitelné v rámci havarijního plánování, ale z pohledu jejich náročnosti na výpočetní techniku i matematické modely mohou být v některých případech více složité než modelace ve vnitřním prostředí [60]. Pro modelaci úniku látky v uzavřeném prostoru lze využít tzv. Computer Fluid Dynamics modely (CFD), které simulují pohyb částic v prostředí. Tyto modely jsou známy například z digitálních aerodynamických tunelů a simulují pohyb částic v různých soustavách o rozdílné hustotě. Obecně je jejich použití značně limitované a velmi náročné pro uživatele i výpočetní techniku [63].

Pro interpretaci výsledků a vyjádření koncentrace dané látky v ovzduší se používají jednotky ppm (parts per million), případně hmotnost na metr krychlový, například mg/m^3 . Pro vyjádření nebezpečné koncentrace plyných látek v ovzduší pro člověka se využívají předem stanovené koncentrace, které jsou specificky definovány pro jednotlivé chemické látky [64, 60]. Jako příklad lze uvést následující koncentrace:

- *AEGL* (Acute Exposure Guideline Levels) představuje úroveň akutní expozice osob nebezpečnou látkou trvající po dobu 10 minut, 30 minut, 1 hodinu, 4 hodiny a 8 hodin. AEGL jsou rozděleny na tři stupně podle předpokládaných zdravotních následků zasažených osob, od prvních známek intoxikace, až po koncentraci nebezpečné látky vedoucí ke smrti jedince [65].
- *IDLH* (Immediately Dangerous to Life and Health) je koncentrace látky bezprostředně ohrožující život a zdraví osob při expozici delší než 30 minut.
- *LC 50* (Lethal Concentration) vyjadřuje střední smrtelnou koncentraci látky v ovzduší. Tato koncentrace je smrtelná pro 50 % organismů exponovaných dané látce.
- *ERPG* (Emergency Response Planning Guidelines) vyjadřuje hodnotu koncentrace nebezpečných látek v ovzduší při expozici trvající jednu hodinu, při které lze předpokládat vznik nepříznivých účinků u exponovaných osob. Tyto účinky jsou podle jejich vlivu na zasažené osoby rozděleny do stupňů ERPG 1 až 3. Tato koncentrace je využívána při plánování bezpečnostních opatření v USA [15, 64].
- *PAC* (Protective Action Criteria for Chemicals) představuje hodnotící koncentrace chemických látek vycházející z koncentrací AEGL, ERPG

a TEEL (Temporary Emergency Exposure Limits – obdoba koncentrace HAU používaná v USA deklarující závažnost následků u exponovaných osob chemické látky), která je dělena do tří stupňů. Koncentrace látky v jednotlivých stupních odpovídá vybrané hodnotě jedné z uvedených hodnotících koncentrací, přičemž výběr hodnoty koncentrace může být pro každou látku jiný. Primárně jsou ovšem používány hodnoty AEGL pro 60minutovou expoziční dobu [66].

V České republice se dále používají čtyři koncentrace, které vycházejí z platných právních norem a Řádu chemické služby HZS ČR. Jedná se o nejvyšší přístupnou koncentraci chemických látek v pracovním prostředí (NPK-P) a přístupný expoziční limit v rámci pracovní doby (PEL). Dále se jedná o havarijní přístupnou koncentraci (HPK-10 nebo 60), která určuje expoziční limit pro záchranáře při zásahu bez použití osobních ochranných prostředků trvajících 10 nebo 60 minut. Následně havarijní akční úroveň (HAU-20 nebo 120), která určuje limitní koncentraci nebezpečných chemických látek a směsí v prostředí, při jejímž překročení je nezbytné zajistit evakuaci obyvatel z kontaminovaného prostoru do 20 nebo 120 minut od zahájení inhalace dané látky [18].

Pro vyhodnocení modelací je dále vhodné využití geografických informačních systémů (GIS), které umožňují vizualizaci potenciálně zasažené oblasti nebezpečnou látkou, případně vytvoření mapy rizik pro danou oblast. Tento druh vyhodnocení je také přínosný z pohledu plánování a realizace opatření ochrany obyvatelstva, zejména ukrytí a evakuace. Při plánování těchto opatření lze v rámci práce s mapovými podklady, vrstvami a zobrazovanými informacemi, identifikovat další potenciální zdroje ohrožení, pokud by došlo k rozšíření události [67]. Dále lze určit oblasti či objekty, ve kterých lze předpokládat provádění evakuace nebo kde může být proces evakuace komplikován typem populace a komplexností objektů. Jedná se například o školy, sociální a zdravotnická zařízení, oblasti s předpokládaným výskytem velkého počtu osob jako jsou obchodní střediska, sportoviště, hlavní stanice hromadné dopravy, vysoce frekventované komunikace bez možnosti jejich časného opuštění, např. dálniční koridory, tunely a další [15].

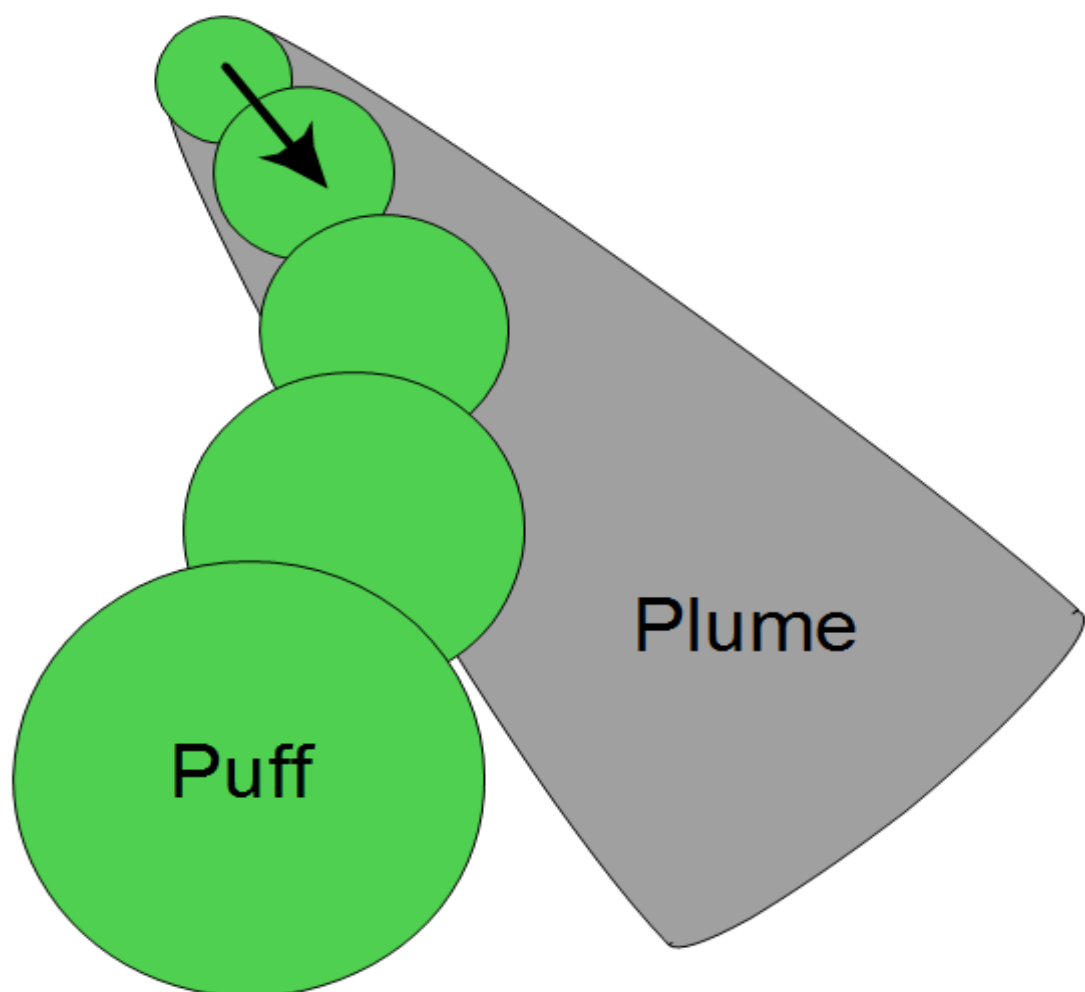
Při modelacích je vycházeno ze tří typů havarijních modelů, scénářů, úniku plyných nebo kapalných látek, které reprezentují jejich havarijní projevy. Havarijní model lze

v souvislosti s únikem nebezpečných chemických látek a směsí definovat jako soubor možných havarijních projevů těchto látek při chemických haváriích. Tyto modely představují rozptyl toxické látky s kontaminací prostředí a intoxikací osob nebo požár či výbuch s ohrožením vznikajícím v důsledku tepelného záření, tlakové vlny při výbuchu, šíření požáru a intoxikací osob zplodinami hoření chemických látek. Analýza těchto projevů pro jednotlivé látky se využívá jako součást analýz rizik, které poskytují informace pro tvorbu havarijních plánů, případně pro poskytování informační podpory veliteli zásahu při řešení mimořádných událostí s únikem nebezpečných látek [12, 21, 68, 64]. Jedná se o následující havarijní modely:

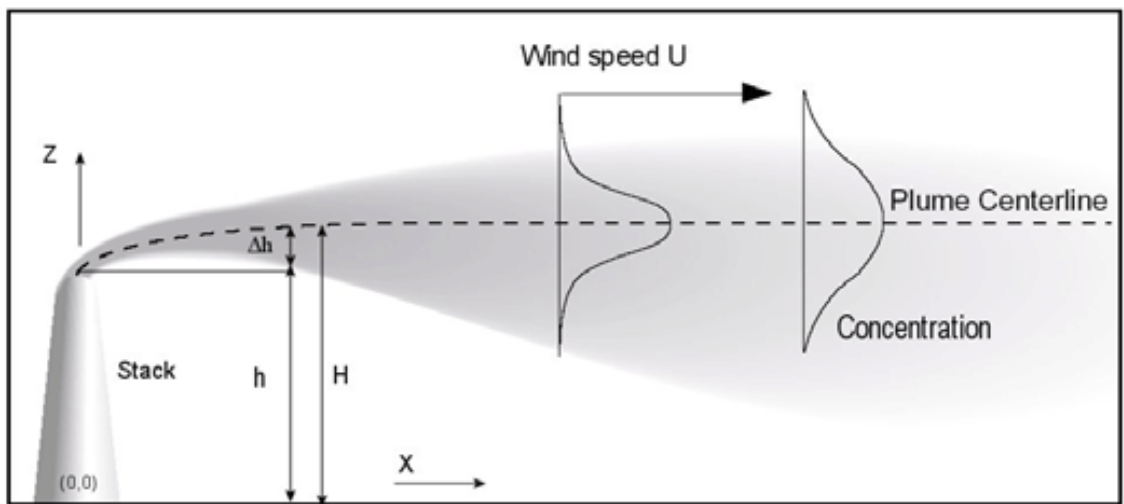
- *Únik toxické látky* představuje jednorázový nebo déle trvající, kontinuální, únik toxické látky do okolního prostředí, případně pomalý odpar kapaliny či vroucí kapaliny s rychlým odparem, únik typu JET. Tento model je charakteristický tvorbou toxického oblaku těžkého plynu, který na základě koncentrace dané látky může mít závažné následky pro zasažené osoby. Jednorázový únik a rychlý odpar vroucí kapaliny je reprezentován modelem PUFF, kontinuální únik a odpar kapaliny modelem PLUME. Tyto modely lze blíže chápat jako pravděpodobnostní znázornění, ve které oblasti se bude látka nacházet. Grafické znázornění uvedených modelů je vyobrazeno na obrázcích 3 a 4.
- *Výbuch plynů, par a prachů* je charakteristický dosahem tlakové vlny a exploze s možným poraněním samotnou vlnou a střepinami. V blízkosti epicentra výbuchu mohou vzniknout smrtelná poranění a poškození okolních budov, vozidel či dalších objektů a předmětů. Jako následek může rovněž vzniknout požár. Tyto jevy lze charakterizovat modelem FIRE BALL, kdy při vznícení a explozi látky dochází ke vzniku ohnivé koule, případně modelem Vapor Cloud Explosion. Při tomto havarijním projevu lze uvažovat i o možném varu kapaliny s postupným zvyšováním tlaku uvnitř zásobníku. Při překročení maximálního tlaku dojde k explozi zásobníku s okamžitou expanzí a uvolněním nebezpečné látky, která vede k vytvoření ohnivé koule. Tento jev je charakterizován modelem BLEVE (Boiling Liquid Expanding Vapor Explosion) a jeho grafické vyobrazení je uvedeno na obrázku 5.
- *Požár plynů a par* představuje déle trvající masivní únik se zahořením, který je reprezentován modelem JET FIRE a vyobrazen na obrázku 6. V případě rychlého, okamžitého vzniku požáru nahromaděné látky v ovzduší se jedná

o model FLASH FIRE, kdy dochází k mžikovému vznícení látky. Pro tyto projevy je charakteristické poranění tepelným zářením a možný vznik požárů v jeho okolí.

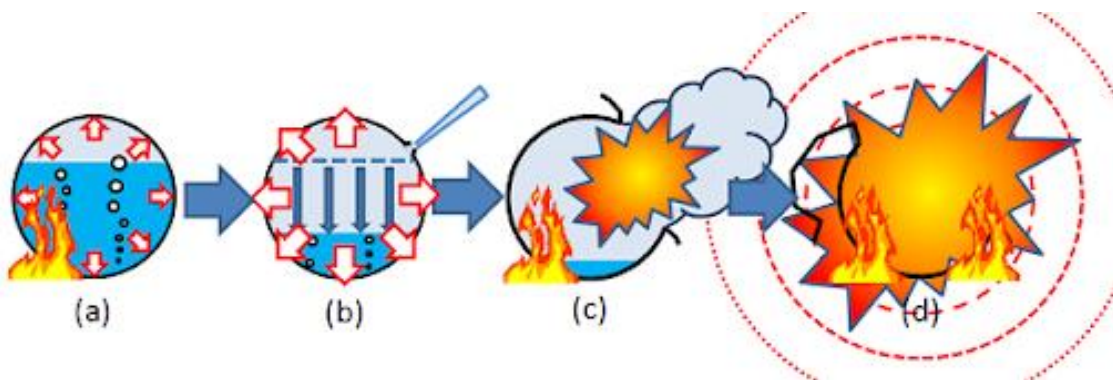
- *Požár hořlavých kapalin nebo pevných látek* představuje hoření kaluže kapaliny či vroucí kapaliny, případně pevné látky, které je reprezentováno modely POOL FIRE a FIRE in SOLID. Pro tyto havarijní projevy je charakteristické ohrožení tepelným zářením a zplodinami hoření [11, 14, 60, 69, 70].



Obrázek 3: Grafické vyobrazení modelů PLUME a PUFF ve vertikální rovině [71]



Obrázek 4: Grafické vyobrazení havarijního modelu PLUME v horizontální rovině dle Gaussovského modelu [72]



Obrázek 5: Grafické vyobrazení havarijního modelu BLEVE [73]



Obrázek 6: Ukázka havarijního modelu JET FIRE [74].

Výše uvedené modely PLUME a PUFF patří mezi základní fyzikální modely pro popis rozptylu uniklých chemických látek. V základní podobě se jedná o difúzní modely rozptylu těžkého plynu při jednorázovém nebo déle trvajícím úniku. Tyto modely mají řadu možných variací a jsou implementovány například v Gaussovském modelu rozptylu plynné látky. Základní pojetí těchto modelů je pro jejich reálné využití zásadně limitováno, jelikož nepočítají s celou řadou fyzikálních jevů, které mají vliv na šíření látky a její disperzi v atmosféře. Pro tvorbu modelací, kdy výsledky budou lépe odpovídat reálným podmínkám, je nezbytné použít komplexní matematické modely, které na druhou stranu budou mnohem náročnější na objem a kvalitu vstupních údajů. Základní modely jsou tedy vhodné jako screeningová či orientační metoda pro jednoduché zhodnocení modelovaného úniku.

Difúzní model rozptylu plynu při kontinuálním úniku (PLUME) počítá s nepřetržitým únikem látky a tvorbou oblaku plynu, přičemž vychází z rovnovážného stavu mezi látkou unikající ze zdroje úniku a látkou podléhající úniku z vytvořeného oblaku, kdy dochází k ředění látky nad danou hodnotou koncentrace. V rámci tohoto modelu není počítáno s předáním kinetické energie plynoucí z charakteristiky a zdroje úniku do vytvořeného oblaku. Tento model lze popsat níže uvedenou rovnicí:

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

- x, y, z = *koordináty výpočtu, vzdálenost od zdroje úniku (m)*;
- $c(x, y, z)$ = *koncentrace látky v určitém bodě (kg/m³)*;
- M = *hmotnostní rychlost úniku látky (kg/s)*;
- u = *rychlost větru (m/s)*;
- σ_y, σ_z = *směrodatné odchylky, rozptylové koeficienty (m) [11, 75]*.

Difúzní model rozptylu plynu při jednorázovém úniku (PUFF) počítá s časově omezeným únikem, avšak nepočítá s možností úniku typu JET, kdy dochází k přenosu kinetické energie z charakteristiky a zdroje úniku na tvořící se oblak plynu. Tento model lze popsat níže uvedenou rovnicí:

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

- x, y, z, t = koordináty a čas výpočtu od začátku úniku, vzdálenost od zdroje úniku (m, s);
- $c(x, y, z, t)$ = koncentrace látky v určitém bodě a čase ($kg/m^3, s$);
- m = množství uniklé látky (kg);
- u = rychlost větru (m/s);
- $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ = směrodatné odchylky, rozptylové koeficienty (m) [11, 75].

3.4.1 Faktory ovlivňující rozptyl a šíření těžkých plynů při úniku nebezpečných chemických látek a směsí v atmosféře z pohledu modelace

Mezi hlavní faktory ovlivňující rozptyl a šíření těžkých plynů při úniku nebezpečných chemických látek a směsí z pohledu modelace a reálného způsobu jejich šíření v atmosféře patří množství a druh konkrétní látky, její chemické a fyzikální vlastnosti, způsob skladování, meteorologické podmínky a charakteristika okolní krajiny [25, 76]. Z pohledu možných havarijních projevů je také důležitým faktorem těkavost látky, na základě které lze predikovat, jestli bude unikající hořlavý plyn nebo odpařující se kapalina náchylná ke vznícení [4].

Před zahájením samotné modelace je nezbytné určit, jaká konkrétní látka uniká do okolního prostředí a v jakém množství. Z chemických a fyzikálních vlastností látek jsou nejdůležitější bod tání a varu, relativní molekulová hmotnost, hustota, relativní hustota par, těkavost a reaktivnost s dalšími látkami. Tyto hodnoty stanoví, v jakém skupenství se bude látka v běžném prostředí nacházet a jestli bude těžší nebo lehčí vzduchu, tudíž jestli se při úniku, případně odpařování, bude držet spíše při zemi či nikoliv. Tento jev blíže závisí i na teplotě samotné látky a okolního prostředí [15, 19]. Pokud dojde k úniku látky, která je lehčí než vzduch, může se za určitých podmínek

rovněž přiblížit charakteristice chování těžkého plynu. Tyto látky mohou při úniku vytvořit oblak s vyšší relativní hustotou, než je hustota okolního vzduchu, což způsobuje jeho klesání k zemi [54]. Vzhledem k fyzikálním vlastnostem, a především bodu varu, je pro samotný únik podstatné, v jakém skupenství je látka skladována. Tento údaj je relevantní obzvláště u chemických látek, které mají bod varu výrazně pod úrovní běžných teplot prostředí, například několik desítek stupňů Celsia pod nulou. Tyto látky lze skladovat v plynném stavu, nicméně v současnosti, i vzhledem k ekonomické stránce, jsou takové látky skladovány převážně zkapalněné. Tohoto jevu je dosaženo buď zchlazením samotné látky pod úroveň bodu varu, nebo jejím stlačením [76].

Pokud je látka zchlazená, bude při potencionálním úniku unikat jako kapalina, která bude vytvářet kaluž, ze které se bude látka pozvolna odpařovat. Rychlost odpařování závisí primárně na vlastnostech látky, její teplotě, teplotě okolí a zemského povrchu. Pokud je látka zkapalněna stlačením, bude unikat jako směs plynu a aerosolu přímo ze zdroje úniku. V tomto případě se jedná o tzv. dvoufázový únik či únik typu JET, kdy uniká kapalná látka s okamžitým odparem [54]. Při tomto typu úniku se bude rovněž projevovat Joule-Thomsonův jev, který způsobuje výrazné ochlazení unikající látky v důsledku uvolnění tlaku a může způsobit námrazu zasaženého povrchu či závažné omrzliny při zasažení osob. Takovýto únik bude zpravidla závažnější s většími a rychleji nastupujícími dopady než únik s pozvolným odpařováním, který ale bude déle trvající při úniku stejného množství látky v obou případech [4, 76].

Při modelaci šíření těžkého plynu v rámci úniku nebezpečných chemických látek a směsí je z pohledu jejich skladování podstatné, v jakém skupenství je látka skladována a jaký je její celkový objem v zásobníku, cisterně či tlakové nádobě. Pokud je plynná látka skladována v kapalném stavu, kterého je docíleno jejím stlačením, je důležitým údajem také tlak látky ve skladovacím zařízení. Při skladování látek je podstatná i nadmořská výška, ve které je únik modelován. Tento údaj má vliv zejména na hodnotu okolního atmosférického tlaku, který má vliv na bod varu kapalných látek. Se zvyšující se nadmořskou výškou bude bod varu mírně klesat. Posledními důležitými údaji z pohledu tohoto faktoru je, jak velikým otvorem látka uniká, kde je tento otvor lokalizován a jaké je množství látky v zásobníku, respektive z kolika procent nebo do jaké míry je naplněn. Na základě stanovení těchto údajů lze dopočítat rychlost úniku,

jak dlouho bude látka unikat a jaké bude její uniklé množství v závislosti na konkrétní látce a výše uvedených faktorech [66].

Dalšími významnými faktory při modelaci rozptylu a šíření těžkých plynů v atmosféře jsou meteorologické podmínky, předpokládáme-li, že látka bude vypuštěna ve venkovním prostředí, nikoli uvnitř budov. V této oblasti je důležitá teplota vzduchu, která má vliv na rychlost odpařování a šíření látky, roční období, ve kterém únik nastal a denní doba. Na základě těchto údajů je možné odhadnout charakteristiku teplotního zvrstvení atmosféry, kterou lze zjednodušeně popsat pomocí šesti tříd, které určuje Pasquillova-Giffordova-Turnerova typizace. Odhad jednotlivých tříd v závislosti na denních a meteorologických podmínkách je uveden v tabulce 4. Charakteristika tříd stability atmosféry je následující:

- *Třída A* – velmi nestabilní podmínky, dochází k nim při silném svitu slunce, jasné obloze a vysoké turbulenci v atmosféře. Následkem je rychlé promíchávání vzduchu a disperze látky, vznik turbulentního proudění vzduchu a časté změny v rychlosti a směru větru. Výskyt této třídy je ojedinělý.
- *Třída B* – středně nestabilní podmínky, které se projevují zejména při slunečném denním počasí s výskytem náhlých poryvů větru. Tato třída se vyskytuje zpravidla při nižších rychlostech větru.
- *Třída C* – mírně nestabilní podmínky, které se vyskytují při středních a mírně vyšších rychlostech větru, kdy nedochází k častému výskytu náhlých poryvů a změnám směru větru.
- *Třída D* – je používána pro neutrální podmínky, tj. pro zcela zataženou oblohu, pro denní i noční čas při nižších rychlostech větru nebo při jasném počasí a středních až vyšších rychlostech větru. Tato třída bývá oproti ostatním v našich podmínkách pozorována častěji.
- *Třída E* – představuje relativně stabilní podmínky při nižší až střední rychlosti větru a vyskytuje se převážně v noci. Výskyt této třídy je poměrně ojedinělý.
- *Třída F* – velmi stabilní podmínky reprezentované mírnými, rovnoměrnými větry při malé oblačnosti, kdy dochází pouze k velmi malé úrovni turbulencí v proudění vzduchu. Tato třída je nejčastěji pozorována v noci. Dochází k pomalejšímu promíchávání vzduchu, a proto se nebezpečné koncentrace

látek mohou dostat ve směru větru i do větších vzdáleností, než by bylo obvyklé v jiných případech [4, 66].

Tabulka 4: Odhad třídy stability atmosféry za specifických podmínek (Pasquillova-Giffordova-Turnerova typizace) [11, 66]

| | | Rychlost větru v přízemní vrstvě, 10 m (m/s) | | | | |
|---|-----------------|---|-----|-----|-----|----|
| | | <2 | 2-3 | 3-5 | 5-6 | >6 |
| Meteorologické podmínky | | <2 | 2-3 | 3-5 | 5-6 | >6 |
| Den, intenzita slunečního záření | Silná | A | A-B | B | C | C |
| | Střední | A-B | B | B-C | C-D | D |
| | Slabá | B | C | C | D | D |
| Noc, oblačnost | Jasno/polojasno | F | F | E | D | D |
| | Zataženo | E | E | D | D | D |

Meteorologický faktor je důležitý i z pohledu potenciálního zasažení osob v budovách. V letních měsících lze předpokládat rychlejší nárůst koncentrace látky uvnitř budov z důvodu jejich větrání. Dále je podstatný směr a rychlost větru, který určuje směr šíření látky a vzdálenost, do jaké může ve stanovených koncentracích od místa úniku dosáhnout. U tohoto faktoru je rovněž důležité, v jaké výšce jsou povětrnostní podmínky měřeny, zda se jedná o přízemní podmínky nebo podmínky měřené v určité výšce nad zemí, které mohou být rozdílné. Dalšími důležitými údaji jsou vlhkost vzduchu, míra pokrytí oblohy mraky a přítomnost inverze nad místem úniku. Například déšť a zvýšená vlhkost na sebe může částečně vázat unikající látku a tím až výrazně omezovat dosah samotného úniku [11, 66].

Posledním signifikantním faktorem je charakteristika okolní krajiny, především její členitost. Obecně lze okolní terén rozdělit na otevřenou krajinu, otevřenou vodní plochu a urbanistickou či lesnatou krajinu [66]. Charakter okolního terénu bude mít zásadní vliv na způsob, rychlost a směr šíření látek. Například při úniku látek v městských zástavbách je nezbytné počítat s rozdílem teplot v přízemních vrstvách a nad úrovní budov. Dále

mohou být rozdílné povětrnostní podmínky v těchto vrstvách a v ulicích může například vznikat turbulentní proudění vzduchu [4, 77].

3.4.2 Vstupní údaje nezbytné k tvorbě modelací

Mezi základní vstupní údaje pro tvorbu modelací obecně patří identifikace a výběr příslušné chemické látky, potažmo dodatečné stanovení způsobu jejího skladování, ze kterého lze vyvodit způsob úniku látky a možné havarijní projevy. Dále stanovení celkového uniklého objemu látky nebo rychlosti úniku, definice okolní krajiny a základní meteorologické podmínky, kterými jsou rychlost větru a teplota okolního vzduchu. Tyto údaje jsou dostatečné pro vytvoření základní orientační modelace s nízkou přesností. Uvedený objem údajů ale není dostatečný k přesnějšímu popisu podmínek v místě události [66, 78]. Přesné parametry a požadované údaje pro modelace se mohou lišit v závislosti na zvoleném modelačním softwarovém nástroji. Uvedený typ modelace využít při neznalosti nebo nedostatku přesných vstupních údajů, kdy budou některé hodnoty stanoveny automaticky dle průměrných a ideálních podmínek. Obecně mohou být hodnoty softwarovými nástroji stanoveny následovně:

- teplota okolního vzduchu 21 °C;
- rychlost větru 3 m/s;
- třída stability atmosféry D-F;
- únik v rovinnaté krajině [78, 79].

Pokud bychom se zaměřili na tvorbu komplexní modelace, je požadovaný objem dat a náročnost na kvalitu vstupních údajů podstatně vyšší. V tomto případě je nezbytné mnohem důkladněji definovat podmínky, za kterých únik nastal a okolní prostředí. Výsledky budou následně na základě odpovídající kvality vstupních informací přesnější. Konkrétní požadované údaje se mohou dle jednotlivých softwarových nástrojů a použitých matematických modelů navzájem lišit. Obecně se jedná o následující údaje:

- *Identifikace látky nebo směsi* a stanovení základních fyzikálních a chemických vlastností je primárním předpokladem pro tvorbu modelací. Dále je podstatný způsob skladování látky, její skupenství, teplota látky a uplatněné fyzikální mechanismy, dle kterých bude možné určit způsob úniku látky.

- Definice zdroje úniku* představuje určení havarijního modelu a projevu unikající látky, který bude modelován. Následně je podstatné stanovit typ zdroje a způsob úniku látky, definování únikového otvoru, určení jeho velikosti, výšky ode dna skladovacího zařízení a výška hladiny kapaliny ve skladovacím zařízení, pokud je látka skladována v kapalném stavu. Z pohledu lokalizace únikového otvoru má významný vliv i jeho lokalizace v zásobníku a směřování. Vertikální úniky směrem vzhůru budou zpravidla menšího rozsahu s pomalejším únikem látky než horizontální. Pokud je látka skladována ve formě zkapalněného plynu pomocí tlaku, je rozhodující určení přetlaku látky uvnitř skladovacího zařízení. Na základě uvedených údajů je možné stanovit rychlost úniku látky. Při určení velikosti a objemu skladovacího zařízení nebo stanovení délky produktovodu lze dopočítat i přibližnou délku trvání úniku. V případě úniku a následného odparu kapalin je navíc podstatné definování velikosti prostoru pro odpařování kapalně látky v okolí skladovacího zařízení. Následně určení objemu kaluže a celkového množství látky nebo výšky hladiny kaluže odpařující se kapaliny. Na základě těchto údajů lze přibližně dopočítat dobu odpařování a celkový objem vzniklé plynné fáze látky. V případě neznámosti přesných údajů ohledně charakteristiky zásobníku a skladování látky lze celkovou dobu a rychlost úniku v některých softwarových nástrojích nastavit manuálně ve formátu objemu za jednotku času.
- Meteorologické podmínky a charakteristika okolní krajiny* představují teplotu okolního vzduchu, určení směru a rychlosti větru, pokrytí oblohy mraky, určení vlhkosti vzduchu a stanovení případné přítomnosti inverze a její výšky nad zemí. Z meteorologických podmínek je dále podstatné stanovení třídy stability atmosféry a určení výšky měření, jelikož se podmínky a jejich stálost mohou v jednotlivých atmosférických vrstvách a výškách lišit. Z pohledu charakteristiky okolní krajiny je nezbytné určit její definici dle typu krajiny, která představuje přibližné určení drsnosti zemského povrchu a členitosti terénu. Orientační určení drsnosti terénu dle typu krajiny je uvedeno v tabulce 5. V případě úniku kapalně látky s následným odparem z kaluže je nezbytné definovat typ podloží v okolí skladovacího zařízení a jeho teplotu. Dále může být vyžadována i nadmořská výška lokace úniku či stanovení ročního období, data a času nebo denní doby, kdy došlo k úniku. Tyto údaje mají vliv na fyzikální vlastnosti látek v dané lokalitě a denní doba je důležitá pro určení příslušné třídy stability atmosféry [4, 66, 78, 80].

Tabulka 5: Uvedení orientační drsnosti terénu dle typu krajiny [66]

| Určení okolní krajiny | Drsnost terénu (cm) |
|--|---------------------|
| Mokřiny, ledová plocha | 0,001 |
| Hladký asfalt (letištní plocha) | 0,002 |
| Otevřená rozsáhlá vodní plocha | 0,01-0,06 |
| Travnatý povrch (do výše 1 cm) | 0,1 |
| Travnatá plocha (letištní) | 0,45 |
| Travnatá plocha (pastviny) | 0,64 |
| Travnatá plocha (do výše 7,5 cm) | 1,0 |
| Travnatá plocha (do výše 10 cm) | 2,3 |
| Travnatá plocha (do výše 50 cm) | 5,0 |
| Zemědělská plocha, pšeničné pole (do výše 18 cm) | 2,44 |
| Travnatá plocha s ojedinělými křovisky a stromy | 4 |
| Vegetace o výšce 1 až 2 m | 20 |
| Stromy o výšce 10 až 15 m | 40-70 |
| Rozsáhlá aglomerace, velké město (např. Tokio) | 165 |

3.4.3 Limity a nedostatky softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu

Hlavní limity a nedostatky modelačních softwarových nástrojů pro modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu vycházejí zejména ze složitosti matematického popisu jednotlivých procesů, které se při úniku látek odehrávají a predikce vývoje meteorologických podmínek. Šíření těžkého plynu v prostředí lze efektivně definovat z pohledu soustav kapalin o rozdílné teplotě a hustotě, které se postupně mísí, ale v případě, kdy do celé soustavy začnou zasahovat externí vlivy, zejména meteorologické podmínky, se začne možnost výpočtu šíření značně komplikovat [60]. Hlavní vliv v této oblasti mají zejména turbulentní proudění vzduchu, nestálost prostředí, možné změny v teplotě, rychlosti a směru větru. Dále zde mají zásadní vliv i podmínky plynoucí z charakteristiky okolní krajiny a členitosti terénu, přítomnost překážek v podobě vegetace, staveb, jejich komplexů nebo náhlého terénního převýšení, které mohou vytvářet překážky v šíření těžkého plynu a variabilitu v meteorologických

podmínkách. Při spojení meteorologických podmínek, zejména proudění vzduchu a členitostí terénu, může vznikat v ulicích turbulentní proudění vzduchu či se mohou na závětrné straně budov vytvářet oblasti s nižším tlakem vzduchu, ve kterých se bude těžký plyn akumulovat ve vyšší koncentraci. Tento jev bude také zvyšovat perzistenci látky v prostředí [77].

Z pohledu modelace je dále nezbytné uvažovat rozdíly mezi jednotlivými matematickými modely určenými pro výpočet šíření chemické látky v prostředí, které jsou používány různými modelačními softwarovými nástroji. Mezi obecně používané modely řadíme například SLAB, HEDEGAS, DEGADIS, RANS, Gaussovský model a další. Rozdíly ve výsledcích mohou být značné, jelikož každý model může pracovat s rozdílnými vstupními hodnotami a výsledek stanovovat dle jiných matematických vzorců [59]. V současné době nedokáže žádný matematický model zcela přesně popsat chování látky v atmosféře, protože nelze přesně predikovat meteorologické změny v prostředí v průběhu času a přesné působení reliéfu krajiny. Tyto nedostatky bychom teoreticky dokázali částečně překonat, pokud bychom měli detailní 3D model okolní krajiny a věděli bychom, jak se v prostoru a času budou meteorologické podmínky měnit, což reálně aplikovat nelze. V tomto případě bychom využili pro modelaci CFD model či jeho variaci, protože bychom znali veškeré proměnné v popisovaných fluidních soustavách [77]. V reálných podmínkách bude ovšem platit pravidlo, že čím členitější bude okolní prostředí a méně stabilní meteorologické podmínky, tím menší bude přesnost výsledků. Totéž platí zejména pro déle trvající úniky, v řádu hodin, nebo úniky, které dosahují do značných vzdáleností od místa úniku, řádově kilometry. Výsledkem modelace tedy bude vykreslení oblasti, ve které se s určitou pravděpodobností může těžký plyn šířit ve stanovené koncentraci nebo ve které lze předpokládat působení dopadů chemické havárie. Čím větší bude oblast šíření látky, vzdálenost od zdroje úniku a čím bude únik déle trvající, tím menší bude validita a přesnost modelace, jelikož výsledek bude zatížen zvyšující se chybou způsobenou terénními a proměnlivými meteorologickými podmínkami. Jako příklad práce s těmito limitacemi lze uvést modelační softwarový nástroj ALOHA, který z těchto důvodů omezuje modelace do vzdálenosti 10 km od zdroje úniku a po dobu trvání maximálně 60 minut [66, 69].

Samotná modelace bude dle současných možností modelačních softwarových nástrojů poměrně přesná v podmínkách, kdy okolní krajina bude rovná, bez přírodních či umělých

překážek a za stálých meteorologických podmínek, tedy za ideálních podmínek, kterých ale takřka nelze dosáhnout. Nicméně, pokud se jedná o modelaci v podmínkách, kdy okolí úniku tvoří členitý terén s výrazným výškovým převýšením, případně lesnatá krajina nebo velké množství různorodých budov, bude modelace zatížena značnou chybou tohoto faktoru. Při interpretaci výsledků modelace je nezbytné brát ohled na tyto faktory, které mohou způsobovat jejich nepřesnost. Výsledné modelace jsou tedy v těchto podmínkách spíše orientační v závislosti na kvalitě vstupních údajů a jednotlivých faktorech ovlivňujících šíření těžkých plynů v prostředí [66]. Problém může rovněž představovat nedostatek vstupních dat, kdy například při úniku nebezpečných chemických látek a směsí nejsou v počátečních fázích zásahu složek IZS známy veškeré údaje, které jsou nezbytné k provedení samotné modelace. Některé modelační softwarové nástroje umožňují provedení modelace i s nedostatkem vstupních dat, které jsou vybrány automaticky dle přednastavených průměrných hodnot, především v oblasti meteorologických podmínek. Výsledná modelace bude v tomto případě značně nepřesná, ale pro provedení orientační modelace může být dostatečná. Následně, po získání chybějících dat, lze modelaci zopakovat s již doplněnými údaji pro zpřesnění výsledků [25, 81].

Další významnou limitací modelací a modelačních softwarových nástrojů je omezení možnosti kalkulace s doplňujícími fyzikálními jevy, které při úniku mohou nastat. Jedná se například o vliv Joule-Thomsonova jevu na samotný únik, který způsobuje tzv. „Auto-Refrigeration Effect“. Tento jev způsobuje při úniku typu JET snížení teploty látky, okolního prostředí i zásobníku a únikového otvoru, který způsobí zpomalení rychlosti úniku látky [60]. Samotné zpomalení úniku se také odehraje z důvodu snížení tlaku uvnitř zásobníku. Dle experimentů Jack Rabbit II, provedených v USA v letech 2015 a 2016, může dojít při horizontálním úniku látky typu JET směrem vzhůru ze zásobníku k výraznému snížení rychlosti a omezení úniku, kdy v zásobníku může zůstat až 70 % objemu látky. Při horizontálním úniku směrem dolů může být reziduální objem látky v zásobníku až 10 % celkového objemu [82, 83].

Další fyzikálně chemický jev, který nelze řádně do modelací zanést, je suchá a mokrá depozice látky do prostředí. S tímto je spojený i možný vznik chemické reakce při kontaktu unikající látky s vlhkostí a vodou v prostředí, která může mít za následek vytvoření jiné chemické látky o objemu a rychlosti, které prakticky nelze predikovat [71].

Totéž platí pro zplodiny hoření chemické látky nebo tvorbu toxického oblaku např. při hoření plastů. Dále nelze modelovat únik chemických látek do vody a simulaci následné ekologické havárie. Další limitací modelací prostřednictvím dostupných softwarových nástrojů je omezená možnost vytvoření komplexních modelací a havarijních scénářů, kdy může dojít k tzv. domino efektu nebo situaci, při které bude unikat více látek najednou nebo z více zdrojů. Modelace jsou primárně limitovány na jeden individuální výsledek. S použitím doplňujících softwarových nástrojů a GIS lze vizualizovat více úniků najednou, ale bez jejich vzájemné interakce [66]. Samotnému domino efektu je nezbytné věnovat pozornost, jelikož se jedná o značně komplikovaný jev, který lze jen obtížně predikovat a potencionální následky mohou vyústit až v nejhorší možný scénář havárie v daném chemickém podniku. Domino efekt v chemickém průmyslu bývá často spojen s projevy požáru a exploze. Jako možná řešení k efektivní a rychlé minimalizaci domino efektu se nabízejí zejména technická opatření, automatické prvky aktivní i pasivní bezpečnosti a zvyšování bezpečnostních standardů, které by měly minimalizovat riziko vzniku sekundární události vzniklé při tomto jevu [13, 14].

3.4.4 Matematické modely pro modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí v prostředí a šíření těžkých plynů

Matematických modelů využívaných modelačními softwarovými nástroji pro výpočet a stanovení dosahu plynné látky v prostředí, včetně predikce jejího šíření v čase a prostoru, existuje celá řada. Předmětem těchto modelů je snaha o co nejpřesnější popis šíření látek v atmosféře, zejména těžkých plynů, včetně vlivu vnějších faktorů na jejich šíření a rozptyl. Obecně lze tyto modely dělit dle jejich komplexnosti a způsobu výpočtu šíření látky na jednoduché, empirické modely, dále středně komplexní, integrální modely a modely mělkých vrstev. Následně komplexní, Lagrangeovské modely pohybu částic a PUFF modely. Mezi nejpokročilejší modely jsou řazeny CFD modely. Základním modelem pro popis šíření těžkých plynů v prostředí byl do sedmdesátých let minulého století Gaussovský model, který ovšem nedokáže řádně reflektovat rozdílné chování jednotlivých plynných látek a vliv externích faktorů na šíření látky. Tento model předpokládá, že šíření látky a vývoj její koncentrace v prostoru podléhá v horizontální i vertikální ose normálnímu rozdělení a koncentrační profil látky má podobu Gaussovy křivky, jejíž šířka je závislá na rozptylu dané látky. Hlavní faktory ovlivňující šíření látky v rámci tohoto modelu jsou rychlost větru a turbulentní proudění vzduchu. Výpočet koncentrace látky pro jednorázový a kontinuální únik je prezentován v níže uvedených

vzorčích. Gaussovský model je v dnešní době používán jako obecný nebo screeningový model a je v určité variaci původního modelu součástí řady softwarových modelačních nástrojů. Mezi modely využívající obecného či v určité formě upraveného Gaussovského modelu lze zařadit modely ADAM, ADMS-5, AFTOX, ASPEN, BLP či SDM [11, 59, 84]. Přehled jednotlivých kategorií modelů s příklady je uveden v tabulce 6.

Níže uvedený vzorec představuje postup výpočtu koncentrace látky při kontinuálním úniku v určitém bodě, Gaussian PLUME model:

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

- x, y, z = koordináty výpočtu, vzdálenost od zdroje úniku (m);
- $c(x, y, z)$ = koncentrace látky v určitém bodě (kg/m^3);
- M = hmotnostní rychlost úniku látky (kg/s);
- u = rychlost větru (m/s);
- H = výška zdroje úniku nad zemí (m);
- σ_y, σ_z = směrodatné odchylky, rozptylové koeficienty (m) [11].

Níže uvedený vzorec představuje postup výpočtu koncentrace látky při okamžitém úniku v určitém bodě, Gaussian PUFF model:

$$c(x, y, z) = \frac{m}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left[\exp \left\{ -\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right\} \frac{-y^2}{2\sigma_y^2} \right] \left[\exp \frac{-(z-h)^2}{2\sigma_z^2} \right] + \exp \frac{-(z+h)^2}{2\sigma_z^2}$$

- x, y, z = koordináty výpočtu, vzdálenost od zdroje úniku (m);
- $c(x, y, z)$ = koncentrace látky v určitém bodě (kg/m^3);
- m = množství uvolněné látky (kg);
- u = rychlost větru (m/s);
- H = výška zdroje úniku nad zemí (m);
- $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ = směrodatné odchylky, rozptylové koeficienty (m);
- t = doba trvání úniku (s) [11, 72].

Jelikož různé látky vykazují na základě jejich fyzikálně chemických vlastností rozdílnou charakteristiku chování v případě úniku plynné fáze, je nezbytné mezi nimi diferenciovat a ke každé látce přistupovat individuálně. Základní Gaussovské modely počítají univerzálně s látkami, které se v prostředí dobře rozptylují a mají charakteristiku neutrálního až pozitivně vzlínavého plynu. V reálných podmínkách je ale řada plynných látek negativně vzlínavých, popřípadě v určité fázi úniku mají charakteristiku těžkého plynu. Pro tyto látky je vhodné použít matematický model určený pro výpočet šíření těžkého plynu či komplexnější modely částic a CFD modely. Pro určení, který typ modelu je vhodné zvolit, lze použít Richardsonovo číslo. Jedná se o bezrozměrnou veličinu, dle které lze určit, jestli bude plyn pozitivně, neutrálně nebo negativně vzlínavý. V rámci modelací se dále v závislosti na jednotlivých přístupech a modelech uplatňuje k popisu fyzikálního chování látky v prostoru Rossbyho číslo, Reynoldsovo číslo, Prandtlovo číslo, Eckertovo číslo a Schmidtovo číslo [60, 66]. Vztah Richardsonova čísla ke vzlínavosti plynu je uveden níže:

$Ri_o \leq 1$, plyn bude pozitivně vzlínavý;

$Ri_o > 1$, plyn bude neutrálně vzlínavý;

$Ri_o \gg 1$, plyn bude negativně vzlínavý.

Richardsonovo číslo pro jednorázový únik lze vypočítat dle následujícího vzorce:

$$Ri_o = \frac{g (\rho_0 - \rho_a) V}{\rho_a A_0 u_*^2}$$

- g = gravitační zrychlení (m/s^2);
- ρ_a = hustota vzduchu (kg/m^3);
- ρ_0 = hustota uvolněné látky u zdroje úniku (kg/m^3);
- V = objem uvolněné látky (m^3);
- A_0 = půdorysná plocha zdroje (m^2);
- u_* = frikční rychlost (m/s) [60, 66].

Richardsonovo číslo pro kontinuální únik lze vypočítat dle následujícího vzorce:

$$Ri_o = \frac{g (\rho_0 - \rho_a) Q}{\rho_a d_0 u_{10} u_*^2}$$

- g = gravitační zrychlení (m/s^2);
- ρ_a = hustota vzduchu (kg/m^3);
- ρ_0 = hustota uvolněné látky u zdroje úniku (kg/m^3);
- Q = objemová rychlost úniku látky (m/s);
- d_0 = rozměr zdroje (m);
- u_{10} = rychlost větru ve výšce 10 m nad zemí (m/s);
- u_* = frikční rychlost (m/s) [60, 66].

Tabulka 6: Dělení a příklady matematických modelů určených pro modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí v atmosféře [59, 60, 75, 84]

| Základní skupina modelů | Podskupina modelů | Příklady modelů |
|--------------------------------------|---------------------------------------|---|
| Jednoduché, empirické modely | | B and McQ model, VDI Guidelines model |
| Středně komplexní, integrální modely | BOX modely | DENZ, CIGALE, HEGABOX, GASTAR, DRIFT, IIT, UDM, UMDSAOS, OZIPR, TRACE, PHAST |
| | Stálé PLUME modely | CRUNCH, IIT II, CALINE3, ISC3 |
| | Obecné stálé PLUME modely | HEDEGAS, DEGADIS, Heavy Gas, DRIFT, GASTAR, UDM, UMDSAOS (poslední 4 pro kontinuální úniky) |
| | Jednorozměrné integrální PLUME modely | HMP, AEROPLUME, HFPLUME, částečně CLOUD, UDM, UMDSAOS |
| | Modely mělkých, smíšených vrstev | ID modely: SLAB, DISPLAY 1, CALPUFF, částečně CLOUD 2D modely: SLAM, TWODEE, DISPLAY 2 |

| | | |
|-------------------------|------------------------------------|---|
| <i>Komplexní modely</i> | Lagrangeovské modely pohybu částic | ADPIC, QUIC, MicroSPRAY |
| | Lagrangeovské PUFF modely | SCIPUFF |
| <i>CFD modely</i> | RANS modely | SIGMET, TRANSLOCK, HEAVYGAS, FEM3, MARIAH, MERCURE-GL, ADREA-HF, MDPG Obecné modely FLACS, FLUENT, CFX, PHOENICS, STAR |
| | LES modely | Speciální modely autorů Murakami, Qiu a spol. |
| | DNS modely | Speciální modely autorů Hortel, Cowan a spol. |

Jednoduché, empirické modely, nejsou v dnešní době v chemické bezpečnosti používány, jelikož nezohledňují řadu faktorů ovlivňujících šíření těžkých plynů v prostředí a byly vytvořeny spíše pro laboratorní prostředí. V určité míře jsou využitelné jako screeningové nebo komparativní metody v malém spektru externích prostředí. Středně komplexní modely představují skupinu několika typů modelů, které jsou vzájemně rozdílné jejich určením a komplexností jednotlivých matematických procesů. Nejkomplexnější kategorií v této skupině tvoří modely mělkých vrstev, které jsou v rámci jedno nebo dvou dimensionálních modelů určeny pro modelaci úniku těžkého plynu při zemském povrchu. Tyto modely blíže zohledňují principy uchování objemu, momentu i energie uvnitř oblaku těžkého plynu a také částečně představují zjednodušenou variantu RANS modelů. BOX modely jsou určeny k popisu okamžitého úniku látky a tvorby oblak těžkého plynu v přízemních vrstvách atmosféry, včetně jejich šíření v prostoru a čase v závislosti na externích faktorech. Pro modelaci déle trvajících úniků obecně používají princip vytvoření série několika posloupných úniků, ze kterých je výsledek složen. Tyto modely také částečně využívají základní rovnici pro popis rozptylu těžkého plynu v atmosféře, ale zohledňují i jednotlivé faktory, které se v tomto procesu uplatňují. Stálé PLUME modely jsou určeny k modelaci kontinuálního úniku látky v přízemních vrstvách atmosféry a jsou v některých ohledech podobné BOX modelům. Koncentrace látky je v tomto případě počítána na základě znalosti rychlosti a objemu unikající látky. Obecné stálé PLUME modely jsou podobné předchozí skupině, ale umožňují lepší a komplexnější

popis chování a šíření těžkého plynu ve větších vzdálenostech od zdroje úniku. V této oblasti se postupně začínají uplatňovat jednotlivé fyzikální procesy a difusní jevy ovlivňující šíření látky v jiné míře či poměru než v blízkosti zdroje úniku. Jednorozměrné integrální PLUME modely jsou oproti výše uvedeným určeny k modelaci úniku látek v podmínkách, kdy se zdroj úniku nenachází při zemském povrchu. Uvedené modely v omezené míře zohledňují také nezbytnost matematického popisu unikajícího plynu v horizontální i vertikální rovině, přičemž kalkulují zejména s působením gravitace [59, 60, 75, 85].

Komplexní Lagrangeovské modely a Lagrangeovské PUFF modely šíření těžkých plynů vycházejí z matematického popisu neutrálně se vznášejících částic. Tyto modely obecně umožňují kalkulovat se zdroji v přízemní vrstvě i v určité výšce na zemi. K popisu šíření těžkého plynu je využito rozčlenění oblaku do „pseudo“ částic, jejichž šíření a disperze v prostředí a čase je následně dopočítána. Tyto modely umožňují i zohlednění turbulentního proudění vzduchu napříč vrstvením atmosféry a jeho vliv na šíření částic. PUFF verze tohoto matematického popisu kombinuje uvedené s Gaussovským modelem šíření těžkého plynu. CFD modely vycházejí z matematického popisu šíření částic ve 3D prostředí, přičemž zohledňují fluiditu jednotlivých soustav v prostředí o různé hustotě a teplotě. Teoreticky jsou tyto modely využitelné pro modelaci šíření kterékoliv látky v libovolném prostředí, nicméně nároky na tvorbu 3D prostředí, přesná vstupní data a detailní definice meteorologických podmínek toto využití významně limitují. Tvorba těchto modelací je rovněž velmi náročná na výpočetní techniku. K popisu šíření těžkých plynů jsou určeny zejména RANS modely, které detailně počítají s turbulentním prouděním vzduchu a umožňují komplexní simulaci pohybu částic. LES modely se oproti předchozím zaměřují na simulaci pohybu částic v podmínkách stálého či plynulého proudění vzduchu a turbulentní proudění zohledňují jen částečně. DNS modely kalkulují pohyby částic při přesné znalosti pohybu vzduchu v každém bodě a čase v modelačním prostředí, což z nich dělá nejnáročnější modely na použití. Jejich využití je tímto limitováno zejména pro modelace s malým počtem a intenzitou změn v proudění vzduchu při jeho plynulém proudění, nikoliv při turbulentním [13, 59, 60].

Při použití jednotlivých fyzikálních matematických modelů lze blíže rozlišit jejich zaměření na modely blízkého a vzdáleného pole (Near-Field models, Far-Field models). Modely blízkého pole bývají většinou modely zaměřené na šíření těžkých, negativně

vzlínavých plynů v prostředí. Tyto modely kalkulují s velmi vysokými koncentracemi látky v blízkosti zdroje úniku a lépe charakterizují chování a šíření těžkého plynu v této oblasti. Modely vzdáleného pole počítají se značně zjednodušeným chováním látky, včetně vlivů externích faktorů, a většinou fundamentálně vycházejí z Gaussovských či Lagrangeovských modelů. Tyto modely dokážou odhadnout potencionální koncentraci látky ve větších vzdálenostech od zdroje úniku, avšak kvůli jejich zjednodušení je nezbytné výsledky brát pouze jako orientační nebo screeningové. V rámci jednotlivých modelů je zásadní nastavení dílčích korekčních faktorů a výpočet následného rozptylu látky v atmosféře [11, 60].

Jako příklad používaných matematických modelů pro výpočet šíření plynné látky v atmosféře lze uvést variaci Gaussovského disperzního modelu dle Pallaziho et al. (1982) [86], jejíž variace je součástí modelačního softwarového nástroje ALOHA. Jedná se o screeningovou metodu pro modelaci rozptylu neutrálně vzlínavého plynu, která je vhodná spíše pro modelaci vzdáleného pole. Dle meteorologických podmínek je matematický vzorec použit v několika variantách, přičemž umožňuje vytvořit modelaci jednorázového úniku, kontinuálního a stálého úniku trvajících do 60 minut s tvorbou jednoho oblaku plynu. Rovněž umožňuje výpočet časově omezeného úniku, který je modelován jako pět po sobě jdoucích úniků s tvorbou pěti oblak plynu [66]. Základní vzorec této modelace pro jednorázový a kontinuální únik je uveden níže:

$$c(x, y, z, t) = \frac{X}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sigma_x \sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{(x - Ut)}{\sigma_x \sqrt{2}} \right) \right] \quad (t \leq t_r)$$

$$c(x, y, z, t) = \frac{X}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x - U(t - t_r)}{\sigma_x \sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{(x - Ut)}{\sigma_x \sqrt{2}} \right) \right] \quad (t_r < t < \infty)$$

- x, y, z, t = koordináty a čas výpočtu od začátku úniku, vzdálenost od zdroje úniku (m, s);
- $c(x, y, z, t)$ = koncentrace látky v určitém bodě a čase ($\text{kg}/\text{m}^3, s$);
- t_r = doba trvání úniku (s);
- X = funkce Gaussovy distribuce při rovnoměrném úniku;
- $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ = směrodatné odchylky, rozptylové koeficienty (m) [66].

Jako příklad modelu šíření a disperze těžkého plynu se zaměřením na modelaci blízkého pole lze uvést model Heavy Gas používaný softwarovým nástrojem ALOHA, který je založen na modelu DEGADIS. Tento model vychází z modelu HEGADAS postaveném na modelaci od Colenbrandera (1980) [87], který je součástí dříve používaného softwarového nástroje HGSYSTEM. Model Heavy Gas používá oproti své předloze pro výpočet koncentračního profilu uvnitř oblaku modifikovaný Gaussovský model. Případně lze zmínit i model šíření těžkého plynu SLAB, který pracuje s výpočtem založeným na řešení šesti bilančních rovnic, které zahrnují výpočet trojrozměrné hybnosti látky, bilanci hmoty, energie a skupenského stavu unikající látky v čase [60, 75]. Uvedené modely sice používají mírně odlišný přístup k modelaci, ale úroveň a kvalita výsledků by měla být za určitých podmínek podobná [88]. Model Heavy Gas je oproti původní verzi modelu DEGADIS mírně zjednodušen a modeluje pouze, pokud je zdroj úniku při zemi. Na druhou stranu je z pohledu doby trvání úniku komplexnější oproti původní verzi modelu, jelikož ALOHA nemodeluje pouze plynulý, rovnoměrný únik, ale především únik s variabilní dobou trvání, kterou modeluje v pěti krocích [66]. Model HEGADAS je určen pro jednorázové i časově variabilní, kontinuální úniky, přičemž umožňuje modelovat několik variant úniku látky a kalkuluje s řadou proměnných, které ovlivňují šíření těžkého plynu a jeho disperzi v atmosféře. Samotná modelace profilu oblaku probíhá na dvě poloviny. Jedná se však o difúzní model a nereflektuje tedy přenos kinetické energie na unikající plyn, únik typu JET [13, 88]. Níže je uveden základní vzorec modelu HEGADAS a modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA pro výpočet koncentrace látky v prostoru:

$$c(x, y, z) = c_A(x) \exp \left[- \left[\frac{z}{S_z(x)} \right]^\beta \right] \quad |y| < b$$

$$c(x, y, z) = c_A(x) \exp \left[- \left[\frac{|y| - b(x)}{S_y(x)} \right]^2 - \left[\frac{z}{S_z(x)} \right]^\beta \right] \quad |y| > b$$

- x, y, z = koordináty a čas výpočtu od začátku úniku, vzdálenost od zdroje úniku (m);
- $c(x, y, z)$ = koncentrace látky v určitém bodě a čase (kg/m^3);
- $c_A(x)$ = nejvyšší koncentrace látky uprostřed oblaku ve směru větru (kg/m^3)

- $b(x)$ = vzdálenost mezi středem oblaku a jeho okrajem v bodě, ve kterém dosahuje koncentrace látky poloviny své maximální hodnoty (m);
- $S_y(x)$ = vertikální rozptyl ve směru osy z (m);
- β = exponent koncentračního profilu [66, 88].

3.4.5 Vybrané softwarové nástroje určené k modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí, včetně šíření těžkých plynů v atmosféře

Modelačních softwarových nástrojů existuje ve světě velké množství. Obecně jsou komerčním artiklem a ve většině případů nepřístupné široké veřejnosti, jelikož jejich využití pro přípravu havarijní dokumentace může být předmětem komerční činnosti soukromého sektoru. Jsou ale dostupné i nástroje, zejména z USA, které jsou volně přístupné v plné verzi a níže zmiňované softwarové řešení obecně patří k nejpoužívanějším nástrojům v této oblasti. Pro výběr vhodného softwarového nástroje, určeného k modelaci úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v prostředí či jiných havarijních projevů, je nezbytné v první řadě určit, v jakých podmínkách a za jakým účelem bude použit. Pro podporu havarijního plánování a přípravu scénářů chemických havárií jsou vhodnými nástroji například ALOHA, RMP*COMP nebo ROZEX Alarm. Pro optimalizaci stanovení zóny havarijního plánování používá HZS ČR softwarový nástroj OPTIZON. Jako další lze uvést nástroj TerEx, který je možné využít pro přípravu havarijních scénářů i pro rychlou orientační modelaci a vyhodnocení úniku nebezpečných chemických látek a směsí v místě havárie [68, 89, 90].

Modelační softwarové nástroje je vhodné doplnit o softwarové databáze nebezpečných látek a směsí, které obecně nabízejí rozsáhlý přehled, včetně podrobných informací o konkrétních látkách. Tyto informace zahrnují fyzikální a chemické vlastnosti látek, včetně jejich reaktivity, dále UN a Kemler kód, případně diamant kód, který se používá v USA. Dalšími uvedenými informacemi bývají doporučení pro hašení dané látky, včetně vhodných hasících prostředků, jaké individuální ochranné prostředky je nezbytné použít, zásady první pomoci a doporučení pro provedení evakuace obyvatel. Tyto informace lze rovněž využít pro poskytování informační podpory veliteli zásahu při řešení chemické havárie prostřednictvím operačního a informačního střediska IZS. Jako příklad softwarových databází lze uvést CAMEO Chemicals nebo MEDIS-ALARM [52, 53, 91].

Modelační softwarové nástroje by měly splňovat základní požadavky, které jsou vyžadovány jak v rámci havarijního plánování, tak i při řešení chemických havárií. V první řadě by měly být jednoduché na ovládání a měly by být schopné rychle poskytnout přehledné výsledky. Veškeré matematické procesy by měly být v maximální míře automatizovány. Modelace by měly být co nejpřesnější a dostatečně reprezentativní, aby bylo na jejich základě možné stanovit doporučení pro zásah složek IZS a další systémová opatření. Výsledkem modelace by měl být také grafický výstup výpočetních hodnot, který lze zanezt na mapový podklad prostřednictvím GIS pro lepší interpretaci. Z tohoto pohledu je ideální, pokud softwarový nástroj umožňuje přímou integraci výsledků do GIS a práci s nimi, přičemž výsledky budou s doplňujícími softwarovými nástroji plně kompatibilní. Modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí by neměla představovat pouze matematický výpočet, ale celé komplexní řešení pro maximální možnou a přehlednou interpretaci výsledků. Dle určení softwarových nástrojů se mohou lišit požadavky, které jsou na jednotlivé typy nástrojů kladeny. Zatímco od nástrojů určených pro podporu havarijního plánování jsou vyžadovány co nejpřesnější výsledky, od nástrojů určených pro rychlou orientační modelaci v místě havárie je vyžadována funkcionální s nedostatkem vstupních údajů. Je ale nezbytné si uvědomit, že výsledky modelací nebudou dle možností těchto nástrojů zcela přesné a vždy je nezbytné je brát jako orientační nebo jako pomocnou a objektivní metodu. Výsledky je nezbytné blíže interpretovat v místních podmínkách, zejména z pohledu geografického zasazení, okolního terénu a také z pohledu nemožnosti přesné inkorporace měnících se meteorologických podmínek [11, 21, 25, 68].

Výsledky modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí dle výše uvedených havarijních modelů se mohou napříč jednotlivými modelačními nástroji významně lišit. Hlavní rozdíly jsou v používaných matematických modelech, kdy každý může pracovat s mírně odlišnými údaji. Modely se liší svou komplexností, použitými hodnotami a konstantami i možnými způsoby vyhodnocení výsledků. Výsledné modelace lze za určitých podmínek vzájemně komparovat napříč softwarovými nástroji a v rámci některých i napříč modelačními přístupy, dle kterých lze modelace vytvářet. Některé nástroje v tomto ohledu nabízejí možnost kalkulace s více matematickými modely při zachování vstupních hodnot, například nástroj ALOHA. Obdobný přístup nabízí i nástroj TerEx [11]. Při tvorbě komparativních modelací je nezbytné zachovat totožné vstupní hodnoty, havarijní scénáře i způsob vyhodnocení, zejména hodnotící koncentrace,

kteře jsou používány k vyobrazení výsledků. Zde je výhodné využít variability nástroje ALOHA, který umožňuje individuální nastavení jednotek i hodnot, které budou použity pro stanovení výsledků a zobrazení zón dle nastavené koncentrace. Některé výsledky ovšem komparovat nelze, zejména pokud jsou příliš rozdílné požadované vstupní hodnoty nebo se zásadně liší charakteristika výsledků.

ALOHA je softwarový nástroj určený k modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí, který je v USA využíván v rámci havarijní připravenosti. Jeho tvůrcem je organizace NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration). Tento nástroj je součástí volně dostupného balíčku softwarových nástrojů CAMEO Software Suite, který dále obsahuje databázový řídicí a informační nástroj CAMEO Data Manager, databázi nebezpečných chemických látek a směsí CAMEO Chemicals a GIS MARPLOT. Výsledky modelace lze zobrazit i v mapovém softwaru Google Earth [89]. Tento nástroj umožňuje modelovat jednorázové i déle trvající úniky, hoření látek a exploze dle příslušných havarijních modelů. Přidanou hodnotou nástroje ALOHA je možnost výpočtu rychlosti úniku látky ze zásobníku, případně rychlost úniku kapaliny s následným odparem na základě určení řady parametrů zásobníku samotného. Dále umožňuje modelaci úniku látky z produktovodu. ALOHA je určena pro tvorbu jednoduchých i značně komplexních modelací, které jsou relativně náročné na vstupní data. Pro výpočet šíření těžkých plynů v prostředí disponuje ALOHA dvěma matematickými modely, modelem šíření těžkých plynů Heavy Gas a Gaussovským modelem. Výstupem modelací je nejen stanovení nebezpečných zón dle zvolených koncentrací, ale také stanovení koncentrace v konkrétním bodě ve zvolené vzdálenosti od zdroje úniku s vyobrazením časové osy, včetně odhadu vývoje koncentrace plynné látky pronikající do budov. ALOHA dále dopočítává rychlost a sílu úniku, celkové uniklé množství látky, dobu trvání úniku a predikuje i typ úniku na základě fyzikálních vlastností zvolené látky a způsobu jejího skladování. Obsluha je vzhledem k velkému množství zadávaných údajů složitější a je pouze v anglickém jazyce. Samotná modelace má dvě omezení, lze modelovat únik maximálně po dobu 60 minut a dosah je omezen na 10 kilometrů [66].

*RMP*COMP* (Risk Management Plan) je volně dostupný softwarový nástroj umožňující provedení rychlé analýzy následků úniku nebezpečných chemických látek a směsí. Jeho tvůrcem je EPA (United States Environmental Protection Agency) a je v anglickém jazyce. Tento nástroj umožňuje vytvoření nejhoršího možného

a alternativního scénáře s výpočtem nebezpečné vzdálenosti od zdroje úniku. Nejhorší možný scénář spočívá v okamžitém úniku celého objemu chemické látky v plynné nebo kapalně fázi. Alternativní scénář je určen pro modelaci provozní havárie, kdy lze ručně stanovit rychlost úniku látky nebo použít odhad rychlosti úniku dle nastavení definovaných parametrů. Jeho omezením je, že při modelaci nelze nastavovat meteorologické podmínky, které jsou zvoleny automaticky dle průměrných hodnot. Výsledky modelace jsou v tomto případě pouze orientační a nelze je zobrazit na mapovém podkladu [79].

HG-SYSTEM je modelační softwarový nástroj obsahující soubor řešení pro modelaci úniku chemických látek dle různých scénářů a variací, který byl vytvořen v roce 1990 výzkumnou sekcí společnosti Shell za podpory dvou desítek chemických a petrochemických společností. Následně byl rozvíjen ve spolupráci se společností Lockheed Martin Energy Systems and Earth Technology za podpory United States Department of Energy. První verze byly zaměřeny na modelaci rozptylu fluorovodíku a ideálních plynů, následně byl rozšířen i o směsi, například LPG. Základním a nejvýznamnějším modelem používaným tímto nástrojem je model HEGADAS určeným pro modelaci rozptylu těžkého plynu. Samotný nástroj obsahuje moduly pro modelaci šíření a disperze plynu v oblasti blízkého i vzdáleného pole pro úniky typu PLUME, PUFF a rovněž pro odpar kapaliny a vroucí kapaliny. V dnešní době byl překonán modernějšími softwarovými nástroji, které jsou celosvětově rozšířeny, například nástrojem ALOHA [88, 92].

TerEx (Teroristický expert) je komerční softwarový nástroj od firmy T-SOFT zaměřený na rychlé stanovení a odhad následků šíření nebezpečných chemických látek a směsí, radioaktivních látek a dopadů teroristických útoků při použití nástražného výbušného systému s přímou návazností na GIS, který je jeho součástí. Tento nástroj lze použít pro modelace při nedostatku vstupních informací a nabízí operativní využití i poskytování informační podpory při řešení chemických havárií. *TerEx* je koncipován jako modulární systém a jeho obsluha je uživatelsky přívětivá. Jednotlivé moduly umožňují provést modelaci buď na základě výběru nebezpečné látky nebo podle zvoleného havarijního modelu. Pro tyto účely nástroj *TerEx* nabízí 12 havarijních scénářů, které jsou v některých případech dílčími variacemi jednotlivých obecných havarijních modelů. Výsledky modelací vyobrazují maximální možné následky havárie a lze

je následně zobrazit na mapovém podkladu. Tento softwarový nástroj rovněž obsahuje vlastní databázi nebezpečných chemických látek a směsí. V roce 2019 byl nástroj TerEx rozšířen o modul DEGAS, který je zaměřen na komplexnější modelace úniku toxických látek ve formě těžkého plynu a oproti ostatním modulům dosahuje značně přesnějších výsledků [60, 78].

OPTIZON vznikl jako výstup projektu „Optimalizace stanovení zóny havarijního plánování a tvorby havarijních plánů na základě ohrožujících projevů nebezpečných chemických látek a směsí při provozních haváriích s ohledem na zvýšení ochrany obyvatelstva“. Primárně je využíván k optimalizaci stanovení zón havarijního plánování a ke zlepšení úrovně ochrany obyvatelstva v České republice. K tomuto účelu jej využívají HZS ČR a krajské úřady [90]. *OPTIZON* byl vytvořen na základě analýzy deterministické indexové metody používané v Itálii, která je určena pro stanovení zón havarijního plánování s ohledem na požadavky direktivy SEVESO II dle směrnice rady Evropy 96/82/EC. Tato metoda je používána i v dalších státech. Výsledkem analýzy bylo určení kritérií pro stanovení velikosti zóny havarijního plánování, které *OPTIZON* využívá [93].

ROZEX Alarm je komerční softwarový nástroj určený k modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí, včetně hořlavých a výbušných látek, a stanovení prognózy jejich havarijních projevů. Jeho tvůrcem je společnost TLP. *ROZEX Alarm* lze využít i pro poskytování informační podpory veliteli zásahu. Tento nástroj rovněž obsahuje vlastní databázi nebezpečných látek a směsí, která čítá přibližně 8 000 položek. Pro tvorbu modelací nabízí 19 scénářů, které jsou variantami obecných havarijních modelů. Výsledky modelací jsou stanoveny na základě maximálních možných následků havárie a lze je zanást na mapový podklad [94].

FLACS – Effects je norský softwarový nástroj vyvinutý společností GEXCON k modelaci následků chemických havárií při úniku plynných nebo kapalných toxických a hořlavých látek dle korespondujících havarijních modelů. Celkově disponuje počtem 70 havarijních modelů, které jsou především variacemi obecných modelů. Možnosti modelace dle různých scénářů jsou tedy velmi široké. Tento nástroj umožňuje modelaci několika variant úniků plynných látek, úniku neutrálního plynu, těžkého plynu a turbulentního úniku. Dále umožňuje modelovat okamžité, střednědobé i kontinuální

úniky. Rovněž umožňuje vypočítat rozměry oblaku toxické látky, tepelné záření při vznícení látky, přetlak tlakové vlny při explozi a další. Dále umožňuje vizualizaci výsledků na mapovém podkladu. Uvedená společnost je také autorem simulačního softwarového nástroje využívající CFD model pro simulaci šíření látky ve specifickém prostředí [95].

4 METODIKA

Při zpracování disertační práce byly v obecné rovině použity univerzální vědecké metody indukce a dedukce, interpretace, analýzy a rešerše tematicky zaměřené odborné literatury, volného internetu a vědeckých databází, kterými jsou především Wiley Online Library, Web of Science a Scopus, a to zejména k tvorbě rešeršní a popisné části práce. Analyzována byla oblast chemické bezpečnosti a chemických havárií, téma těžkého plynu, modelování následků chemických havárií pomocí softwarových nástrojů a rovněž aktuálních právních předpisů ČR a EU. Dále byly analyzovány významné dokumenty nelegislativního charakteru definující a popisující oblast chemické bezpečnosti a prevence závažných havárií. V oblasti chemických havárií a jejich analýzy bylo vycházeno opět z odborné literatury a vědeckých článků, ale i ze studia vyšetřovacích zpráv havárií a databází chemických havárií, kterými jsou zejména francouzská databáze ARIA, evropský systém a databáze eMARS a americká databáze CSB. Zjištěné poznatky byly interpretovány a shrnuty v části práce uvádějící přehled současného stavu. V oblasti modelace následků chemických havárií byla pozornost věnována zejména problematice těžkých plynů a analýze možností modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí a jejich šíření v atmosféře. Tato část vycházela mimo výše uvedených zdrojů i z popisu, dostupné dokumentace a samotné práce s vybranými softwarovými nástroji, přičemž byla širší pozornost věnována nástrojům TerEx a ALOHA z důvodu jejich následného využití ve výzkumné části práce.

Při tvorbě praktické a výzkumné části práce byly použity vědecké metody experimentálního a aplikovaného výzkumu, terénních měření, modelování a observace v oblasti ověření chování těžkého plynu v prostředí za pomoci vybraného stopovače těžkého plynu. Tyto experimenty byly realizovány v rámci řešení projektu TH01031098 „Validace a verifikace modelu šíření a disperze těžkého plynu za specifických situací (DEGAS)“, na který je disertační práce navázána. K verifikaci a validaci výsledků a výstupů tohoto projektu bylo použito metody komparativních modelací šíření těžkého plynu pomocí modelačních softwarových nástrojů a jejich vzájemné zhodnocení. Hlavním výstupem projektu bylo vytvoření modulu DEGAS určeného k modelaci šíření a disperze těžkých plynů v atmosféře jakožto součást modelačního softwarového nástroje TerEx. Tento modul byl dále využit k tvorbě komparativních modelací dle podmínek vybraných chemických havárií, jejichž výsledky byly komparovány s reálnými

podmínkami havárií a s výsledky modelací softwarového nástroje ALOHA, který byl v této oblasti použit jako referenční.

4.1 Experimentální šetření a terénní experimenty projektu DEGAS

Hlavní výzkumná část disertační práce je přímo navázána na projekt TH01031098 „Validace a verifikace modelu šíření a disperze těžkého plynu za specifických situací (DEGAS)“, který byl podpořen Technologickou agenturou České republiky v rámci programu na podporu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje „EPSILON“. Projekt byl řešen v letech 2015 až 2018 a byl realizován za vzájemné spolupráce společnosti T-SOFT a.s., ČVUT v Praze, Fakulty biomedicínského inženýrství, společnosti ERGOWORK s.r.o. a ÚJV Řež, a.s. Hlavním cílem projektu bylo vytvoření softwarového modulu DEGAS určeného pro modelování rozptylu a šíření těžkého plynu za různých povětrnostních podmínek, který je implementován do expertního softwarového nástroje TerEx. Tento modul je určený pro predikci dosahu nebezpečných koncentrací plyných látek a disperzí těžších vzduchu, jejichž únik představuje především v aglomeracích a hustě obydlených oblastech významné riziko. Využití tohoto modulu je možné nejen v oblasti tvorby a aktualizace bezpečnostní dokumentace v souladu se zákonem č. 224/2015 Sb., o prevenci závažných havárií, ve znění pozdějších předpisů, ale i v rámci analýzy chemických havárií, výcviku a edukace odborných pracovníků v oblasti chemické bezpečnosti. Za určitých podmínek může tento modul sloužit jako analytický a preventivní nástroj složkám IZS či orgánům krizového řízení. Na základě výsledků modelací lze navrhnout opatření ochrany obyvatelstva v potenciálně zasažené oblasti a stanovovat bezpečnostní opatření různého charakteru s účelem snížení ohrožení obyvatelstva i životního prostředí v případě chemické havárie spojené s únikem nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu.

V rámci samotného projektu bylo realizováno několik etap, které se zabývaly výzkumem dané problematiky, návrhem řešení matematického modelu, který byl následně použit při tvorbě modulu DEGAS a ověření chování těžkého plynu při terénních experimentech. Tyto experimenty byly rovněž použity jako podklad při doladění

zvoleného matematického modelu a pro validaci výsledků vytvořeného modulu. Samotné experimentální šetření a celkový proces byl poměrně ojedinělý a obdobných experimentů je celosvětově realizováno pouze malé množství. Tato disertační práce byla zaměřena především na sekci terénních experimentů a následné validace výsledků modulu DEGAS. Disertační práce na řešený projekt dále nezávisle navazuje a zabývá se výzkumem validity modelací úniku chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře v obecné rovině. K tomuto účelu byly analyzovány tři vybrané reálné chemické havárie, jejichž podmínky a dopady byly modelovány prostřednictvím modulu DEGAS a referenčně softwarovým nástrojem ALOHA.

V rámci projektu DEGAS byly uskutečněny dva terénní experimenty. Jejich účelem bylo za pomoci vybraného stopovače, v tomto případě oxidu uhličitého (CAS 124-38-9), ověřit chování těžkého plynu při úniku z technologického zařízení. Tento plyn byl zvolen na základě jeho nízké úrovně toxicity, vysoké dostupnosti, možnosti relativně bezpečného vypuštění z tlakového zásobníku a možnosti snadné detekce. Oxid uhličitý kvůli svým fyzikálně chemickým vlastnostem rovněž vytváří za běžných podmínek při úniku z tlakové nádoby oblaka těžkého plynu, která lze v koncentraci přesahující 10 000 ppm viditelně pozorovat [60, 61]. Při experimentech byly analyzovány časové změny v průběhu rozptylu oblaku a za pomoci detekčních přístrojů měřeny jeho charakteristiky, dosahy zraňujících koncentrací, distribuce v prostoru a další. Oba terénní experimenty byly realizovány ve spolupráci s Armádou České republiky (dále jen AČR), konkrétně se 151. ženijním praporem 15. ženijního pluku AČR. Tento útvar poskytl pro potřeby experimentů polygon vojenského letiště ve vojenském prostoru u Bechyně (N 49°16.565', E 14°29.761') a doplňující personál v podobě družstva vojenských hasičů, meteostanici a elektrocentrálu s obsluhou.

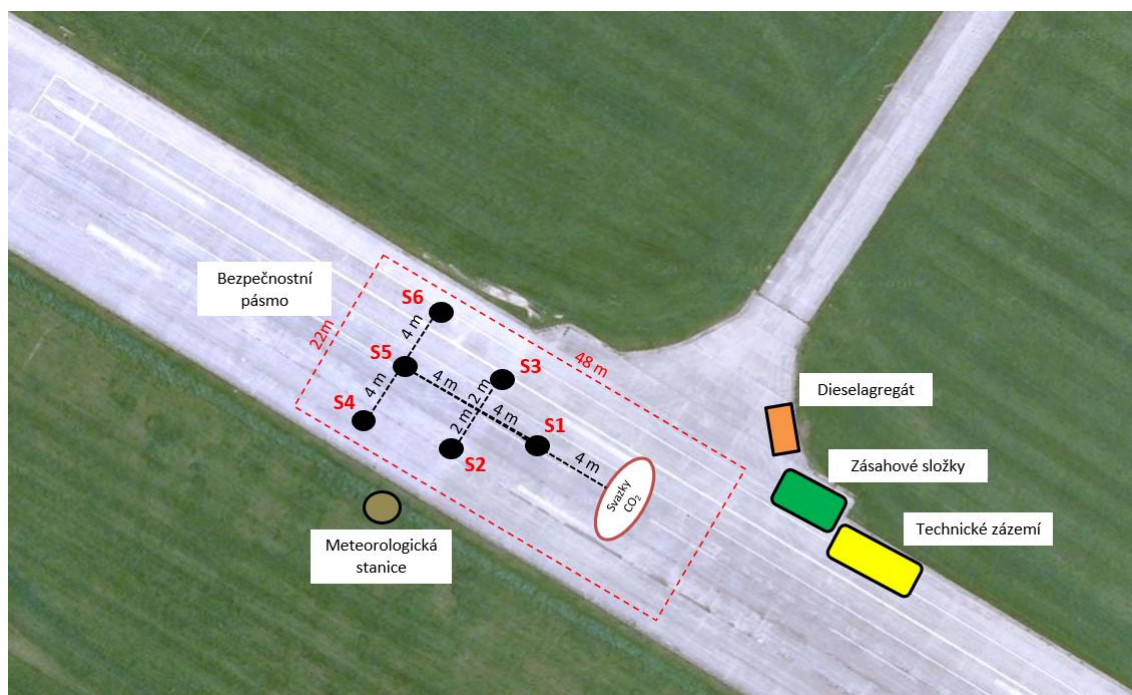
V případě obou experimentů probíhaly v rozmezí dvou dnů před samotným experimentem komplexní přípravy spočívající ve vymezení testovací oblasti, umístění zdroje stopovače na pozici, nácviu rozmístění a zprovoznění detekčních přístrojů, jejich kalibrace a v dalších nezbytných činnostech, aby byl zajištěn bezproblémový a bezpečný průběh experimentů. Bezpečnost obou experimentů byla zajištěna zejména vhodným dispozičním nastavením experimentů, kdy bylo veškeré zázemí situováno za zdroj úniku stopovače v dostatečné vzdálenosti a samotný experiment byl orientován po směru větru. Přibližný dosah nebezpečné koncentrace použitého stopovače byl odhadnut na základě

obecného předpokladu šíření látky a na základě vytvoření orientační modelace prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA. Testovací oblast byla po dobu experimentů viditelně označena a byl zde nařízen zákaz vstupu. Pro zajištění bezpečnosti v oblasti zázemí a místa, odkud probíhala observace experimentu, byl použit dodatečný detekční přístroj pro měření kontinuální koncentrace oxidu uhličitého. Při ani jednom z experimentů nebylo v tomto prostoru dosaženo koncentrace látky 1 000 ppm, která je označována za hraniční koncentraci, od které lze pociťovat první příznaky intoxikace. Před samotnými experimenty rovněž proběhlo pro zúčastněné osoby školení BOZP.

První experimentální šetření bylo realizováno dne 26. října 2016 a jednalo se ověřovací experiment, na základě kterého měla být zejména ověřena a doladěna metodika před druhým, ostrým experimentem. V rámci provedeného terénního experimentu byly jako zdroj oxidu uhličitého zvoleny tlakové lahve v počtu 60 kusů dodané společností Air Liquide a.s., které byly umístěny v pěti svazcích po dvanácti lahvích s celkovým objemem 2 250 kilogramů zkapalněného plynu. Jednotlivé lahve ve svazku byly svedeny do jedné společné výpustě o průměru přibližně 2 cm. Svazky byly umístěny vedle sebe do mírného oblouku, aby byl plyn vypouštěn přibližně do stejného prostoru, ve kterém se nacházel první detekční přístroj. Při experimentu byly svazky otevírány manuálně výpustními ventily postupně v krátkém časovém intervalu. Celý experiment byl zaznamenáván audiovizuálním systémem, včetně dvou termokamer a dronu s kamerou. Pro nastavení záznamových zařízení byla před zahájením experimentu provedena zkouška a vizualizace šíření látky pomocí zkušebních dýmovnic. Koncentrace plynu byla měřena prostřednictvím série detektorů (Lutron, typ CO2-9904SD), které odečítaly data v intervalu dvou vteřin. Konkrétně bylo použito šest detekčních přístrojů umístěných do stromové formace, viz obrázek 7. Detektory byly umístěny v podélné a příčné ose ve směru unikajícího plynu od zdroje úniku s definovanými rozestupy v řádu několika metrů. Jedná se o detektory s infračervenými senzory fungujícími na principu NDIR. Udávané detekční rozmezí přístrojů je 0 až 6 000 ppm, nicméně dle výrobce umožňují přístroje měřit až koncentraci o hodnotě přibližně 10 000 ppm, než dojde k přehlcení senzoru. Rozlišovací schopnost detektorů je 1 ppm. Přístroje umožňují také zaznamenávat relativní vlhkost vzduchu (rozmezí 10 až 95 %), teplotu (rozmezí 0 až 50 °C), jsou vybaveny alarmem při překročení nastavené koncentrace látky a umožňují zaznamenávat naměřená data na SD kartu až po dobu 8 hodin [96]. Na závěr terénního experimentu byla provedena vizualizace proudění vzduchu v daných

podmínkách a šíření dýmového oblaku v prostředí, který měl simulovat šíření podstatně většího oblaku plynu, který byl předpokládán při druhém experimentu.

Hlavním cílem prvního šetření bylo především ověření a doladění metodiky experimentu před provedením druhého, hlavního experimentu a získání praktických zkušeností řešitelského týmu s procesem a podmínkami experimentu. Cíle prvního experimentu byly konkrétně zaměřeny na ověření vhodnosti a spolehlivosti zvoleného stopovače k experimentálním účelům, včetně vhodnosti a kvality jeho detekce pomocí zvoleného typu detekčních přístrojů. Dále byly prověřeny možnosti dodání chemických látek, zajištění veškeré logistiky, spolupráce s dotčeným útvarem AČR a byly taktéž prověřovány dílčí náležitosti technického charakteru k záznamu experimentu. V rámci testovací plochy byly zkoumány její dispoziční možnosti, nejvhodnější rozestavení a orientace experimentu.



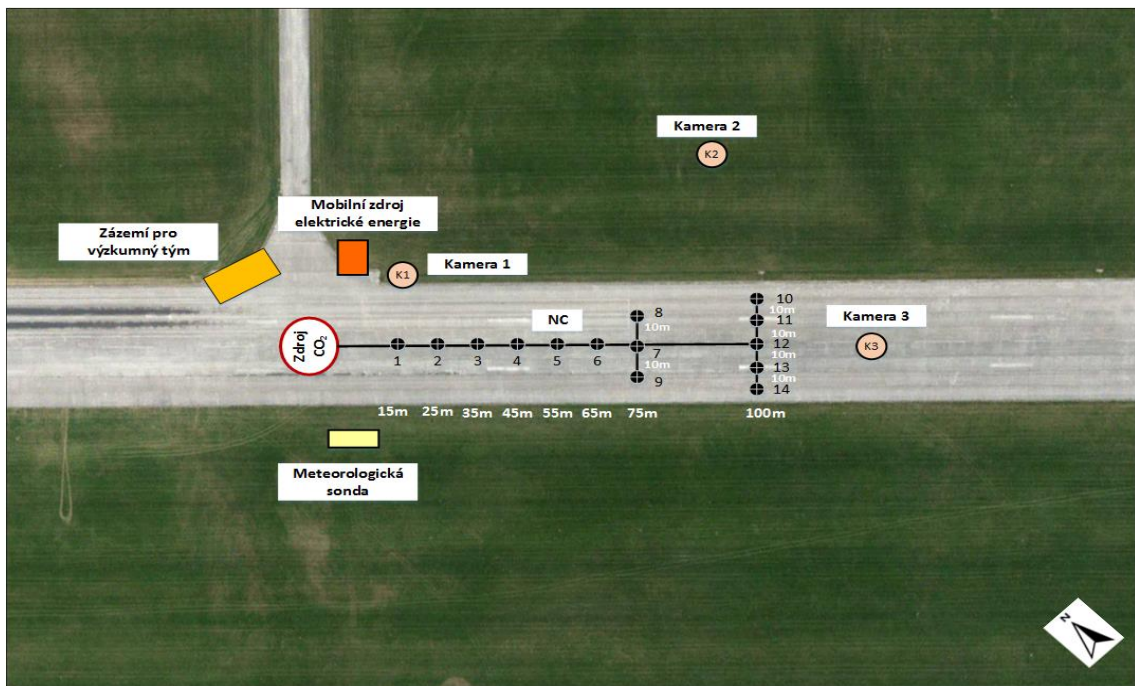
Obrázek 7: Situační schéma prvního, ověřovacího experimentu [60]

Na základě výsledků prvního experimentu byla doladěna metodika a ověřeny sledované cíle, jež přispěly k důkladné přípravě druhého terénního experimentu. Tento experiment spočíval v provedení validačních testů a verifikaci navrženého matematického modelu šíření a disperze těžkých plynů v rámci projektu DEGAS. Námětem experimentu byla nehoda cisterny převážející stlačenou chemickou látku s jejím následným únikem prostřednictvím omezeného otvoru představující poškození

plášťe cisterny. Samotný experiment byl realizován dne 12. dubna 2017. Při tomto experimentu byl zvolen totožný stopovač, nicméně byl v tomto případě jako zdroj úniku použit horizontální cylindrický tlakový zásobník na ocelovém rámu o objemu 6 tun zkapalněného plynu o tlaku 18 barů při naplnění. Chemický zásobník a zvolený plyn dodala společnost Linde Gas a.s. Na výpusť zásobníku byla aretována kovová trubka s ventilem o délce 1 m s průměrem 4 cm, jejíž ústí bylo přibližně 1 m nad zemí. Tato trubka sloužila jako výpusť a zdroj šíření plynu při experimentu. Veškeré nastavení zásobníku a instalace výpusťe byla provedena techniky společnosti Linde Gas a.s. Zásobník byl manuálně otevřen pomocí pákového mechanismu adekvátně bezpečnostně vybavenými příslušníky hasičské jednotky AČR. Celý experiment byl zaznamenán audiovizuálním systémem, třemi kamerami a dronem s kamerou. Termokamery již použity nebyly. Koncentrace plynu byla měřena pomocí série detektorů a jejich počet byl adekvátně navýšen oproti prvnímu experimentu na 14. Detektory byly rozmístěny v rozšířené stromové formaci, viz obrázek 8. Detektory byly umístěny v podélné a příčné ose ve směru unikajícího plynu od zdroje úniku s definovanými rozestupy v řádu desítek metrů, jelikož byl při tomto experimentu předpoklad tvorby podstatně většího oblaku těžkého plynu než při prvním experimentu. Z tohoto důvodu bylo vhodné využití většího počtu detektorů k pokrytí adekvátní oblasti. Pro měření byly znovu použity detektory Lutron, typ CO2-9904SD v počtu 13 kusů a jeden detektor Lutron MCH-383SD s detekčním rozsahem 0 až 4 000 ppm, přičemž ostatní funkcionality je obdobná prvnímu typu [97]. Nastavený čas odečtu hodnot byl 2 vteřiny a data byla ukládána v každém přístroji na SD kartu. Pro měření charakteristiky tvořícího se aerosolu v oblaku těžkého plynu, který vzniká v důsledku Joule-Thomsonova jevu, bylo použito přístroje Grimm NanoCheck 1365, který obsahuje laserový fotometr Grimm 1.109 a čítač nanočástic NanoCheck-1320 (NC), jež funguje na principu colorimetrie s měřicím rozsahem 0,25 až 32 μm [98]. Cíle druhého experimentálního šetření spočívaly zejména v realizaci hlavního experimentu, jeho komplexním zabezpečení a simulaci průběhu nehody s únikem chemické látky v plynné formě. Dále v provedení samotných měření a jejich záznamu pomocí detekčních přístrojů, zajištění přípravy dat k následnému vyhodnocení a doladění modulu DEGAS.

Jedním z výstupů experimentálního šetření bylo doladění výpočtů v rámci modulu DEGAS. V další fázi byly provedeny modelace samotného experimentu prostřednictvím modulu DEGAS a modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA, který byl v tomto

případě použit jako referenční z důvodu jeho dostupnosti, vysoké míře použití v praxi a jelikož se jedná o vysoce uznávaný nástroj v oblasti chemické bezpečnosti. Vytvořené modelace a jejich výsledky, dosah látky v určité koncentraci a vypočtená koncentrace ve stanoveném bodě v definované vzdálenosti od zdroje úniku byly následně komparovány navzájem a také s hodnotami, které byly při terénním experimentu naměřeny a predikovány. Naměřené hodnoty jsou však zatíženy chybou měření v důsledku použité fyzikální metody v úrovni přibližně 10 %. Tyto hodnoty byly posléze vizualizovány na mapovém podkladu v sérii obrázků, které znázorňují vývoj naměřené koncentrace látky prostoru a v čase. Výsledná data byla následně korigována a upravena na základě série modelací, aby bylo možné vytvořit realistický odhad koncentrace, která se v prostoru mohla vyskytovat. Výsledné hodnoty byly použity při komparaci výsledků modelací s reálnými podmínkami experimentu a umožnily validovat a verifikovat výstupy projektu DEGAS.



Obrázek 8: Situační schéma druhého, ostrého experimentu [60]

4.2 Modelování úniku a šíření těžkých plynů a komparativní modelace prostřednictvím vybraných modelačních softwarových nástrojů

Softwarové modelování představuje proces aplikace různých matematických modelů k řešení dané problematiky. Pro účely disertační práce byly použity softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí a jejich šíření ve formě těžkých plynů v atmosféře. Modelovat lze i jiné havarijní projevy chemických havárií. Vzhledem k provedenému výzkumu byly modelace zaměřeny výhradně na problematiku modelace úniku toxické látky v plynném skupenství při formování těžkého plynu. Modelace byly blíže zaměřeny na výpočet a predikci šíření těžkého plynu v prostředí, přičemž byly sledovány zejména koncentrace látky v prostoru, její vztah ke vzdálenosti od zdroje úniku a dosah zraňujících koncentrací. K vyhodnocení tohoto dosahu bylo využito koncentrací IDLH a AEGL 2 a 3. Hodnota AEGL 1 nebyla zvolena z důvodu její nízké úrovně oproti ostatním hodnotám AEGL a při jejím vykreslení se může projevit omezení maximální vzdálenosti výpočtu jednotlivých modelačních nástrojů. Z pohledu zdravotních dopadů chemických havárií jsou stěžejní koncentrace AEGL 2 a 3. Pro modelaci byly zvoleny softwarové nástroje TerEx a ALOHA. TerEx byl zvolen z důvodu zaměření disertační práce a aplikovaného výzkumu, jelikož hlavním výstupem projektu DEGAS bylo vytvoření modulu DEGAS určeného pro modelaci šíření a rozptylu těžkého plynu, který je součástí uvedeného softwarového nástroje. Pro modelace byl tedy použit výhradně modul DEGAS. Softwarový nástroj ALOHA byl zvolen z důvodu jeho všeobecné rozšířenosti a rozsáhlého využití v rámci chemické bezpečnosti u nás i ve světě, přičemž v současné době platí za neformální standard v této oblasti. Pro tvorbu modelací tímto softwarovým nástrojem bylo použito výhradně modelu Heavy Gas, který je shodně určen pro modelaci šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře. Výsledky modelací a vypočtené zóny byly následně zaneseny na mapové podklady. Pro vizualizaci výsledků softwarového nástroje TerEx byl využit jeho integrální modul umožňující tuto funkcionalitu, který používá mapové podklady OpenStreetMap. Pro vizualizaci výsledků softwarového nástroje ALOHA byl použit sekundární softwarový nástroj s funkcionalitou GIS, nástroj MARPLOT, který je určen k vizualizaci výsledků modelací a dalších informací z balíčku softwarových nástrojů CAMEO Software Suite, jehož je ALOHA součástí. Použitými mapovými podklady jsou v tomto případě Google Maps.

Předmětem modelací byly podmínky a dopady vybraných reálných chemických havárií, které posloužily jako zdroj vstupních údajů. Chemické havárie byly vybrány z databází chemických havárií ARIA a CSB, jelikož tyto databáze obsahují detailní popis událostí. Studovány byly rovněž vyšetřovací zprávy vybraných havárií, které byly dostupné a relevantní pro výzkum. Kritériem výběru havárií byla nezbytnost havárie s únikem chemické látky v plynné fázi a její šíření ve formě těžkého plynu ve vnějším prostředí. Dále musely být dohledatelné nezbytné vstupní údaje pro vytvoření samotných modelací. Posledním kritériem bylo uvedení vyhodnocení události v jejím popisu či vyšetřovací zprávě, buď přímo uvedení velikosti zasažené oblasti, potažmo vzdálenosti, ve které byl unikající plyn detekován, nebo poskytnutí dostatečně kvalitních údajů, ze kterých bylo možné odvodit dosah látky v určité koncentraci. Celkem byly tímto způsobem vybrány tři chemické havárie různého charakteru, které tvoří reprezentativní vzorek pro provedení komparace výsledků modelací a stanovení jejich validity.

Požadované vstupní údaje pro vybrané softwarové nástroje jsou uvedeny v následujícím výčtu (A – údaj požadovaný pouze nástrojem ALOHA, T – údaj požadovaný pouze nástrojem TerEx):

- výběr látky umožňující tvorbu těžkého plynu, která je součástí databází obou nástrojů, skupenství skladované látky;
- přesná lokace, vč. nadmořské výšky, datum a čas úniku (A), denní doba a roční období (T);
- meteorologické podmínky:
 - rychlost a směr větru;
 - výška měření meteorologických podmínek nad zemí;
 - teplota vzduchu;
 - relativní vlhkost;
 - úroveň pokrytí oblohy mraky;
 - výška inverze, je-li přítomna (A);
 - doba vzniku události – predikce třídy stability atmosféry;
- charakteristika okolní krajiny;
- typ okolních budov (A);
- charakteristika úniku a zdroj úniku:
 - typ/zdroj úniku a rozptylu;

- rychlost úniku (A);
- teplota látky ve skladovacím zařízení;
- objem látky uvnitř skladovacího zařízení (A)
- velikost únikového otvoru a jeho výška nad zemí;
- doba trvání úniku;
- přetlak látky uvnitř zařízení (T).

Vstupní údaje jsou v některých bodech rozdílné, jelikož každý softwarový nástroj používá odlišný matematický model. U nástroje ALOHA je při zvolení modelu Heavy Gas umožněno modelovat čtyři typy úniku. Jedná se o přímý únik, který je jednorázového nebo kontinuálního charakteru, odparu látky z kaluže, únik ze zásobníku nebo únik z produktovodu. Modul DEGAS na druhou stranu umožňuje modelaci jednorázového úniku, horizontálního nebo vertikálního úniku ze zásobníku typu JET a odpar látky z kaluže. Nástroj ALOHA umožňuje modelaci přímého úniku látky dle zadání rychlosti a doby trvání úniku, potažmo objemu uniklé látky. Sekundárně umožňuje modelaci úniku, při kterém je zdrojem zásobník o definovaných parametrech. Proces modelace se zadáním velikosti a naplněnosti zásobníku ovšem slouží k výpočtu rychlosti a doby trvání úniku látky ze zásobníku. Pro komparativní modelace byla v nástroji ALOHA zvolena metoda s přímým jednorázovým nebo kontinuálním únikem látky ze zařízení. Nicméně ALOHA neumožňuje počítat s variací vertikálního úniku a pracuje pouze s únikem v horizontální ose.

Přetlak látky uvnitř skladovacího zařízení byl zjišťován buď z dostupných informací o haváriích, nebo byl vyčten z tabulek prezentujících závislost teploty a tlaku různých látek dostupných například z webu Gas Encyclopedia Air Liquide, které prezentují minimální tlak látky při dané teplotě, kterého musí být dosaženo, aby byla látka zkapalněna [99]. Výčet těchto hodnot může být zatížen určitou chybovostí, jelikož lze plynné látky zkapalněné pomocí přetlaku skladovat i za větších tlaků, než je v tabulkách uvedeno. Meteorologické podmínky a jejich hodnoty použité při tvorbě modelací vycházely z vyšetřovacích zpráv havárií a z dostupných údajů online databází počasí. Dostupnost přesných dat může být zejména u událostí staršího data značně omezena a rovněž u událostí mladšího data nemusí být dostupná zcela přesná data. Měřicí stanice, ze které jsou data dostupná, nemusí být přímo v blízkosti místa události, ale pouze v daném regionu. Z tohoto důvodu je nezbytné vzít v potaz i jejich možnou nepřesnost

a hodnoty mohou být oproti reálným podmínkám v místě události mírně odlišné. Měly by však vykazovat dostatečnou podobnost pro tvorbu směřodatných modelací.

Výsledky jednotlivých modelací nástrojů TerEx a ALOHA byly vzájemně komparovány, přičemž byly sledovány hodnoty vypočtené koncentrace látky a její dosah v prostoru. Pro vyhodnocení modelací úniku chemické látky a šíření těžkého plynu nabízí TerEx dvě možnosti. První představuje přednastavené hodnoty, kterými jsou koncentrace IDLH, AEGL nebo PAC dle volby nástroje. Celkově tento nástroj udává oblast pro provedení evakuace osob a oblast pro provedení chemického průzkumu. Uvedené koncentrace a jejich nastavení jsou ovšem fixní a nelze je měnit, aby bylo možné zjistit detailnější informace o vývoji koncentrace látky v prostoru. K tomuto účelu slouží druhá možnost, generace grafu, který prezentuje vývoj koncentrace látky v závislosti na vzdálenosti od zdroje úniku. Tento graf představuje pro účely práce hlavní prostředek získání přesných údajů k provedení následné komparace. Používané jednotky tímto nástrojem jsou mg/m^3 , které jsou zcela validní, ale v zahraničních zdrojích se pracuje zejména s jednotkami ppm. Z tohoto důvodu je nezbytné provést konverzi používaných hodnot mezi uvedenými jednotkami, k čemuž je využito univerzálního převodníku, který kalkuluje při převodu jednotek s molekulovou hmotností vybrané látky.

Softwarový nástroj ALOHA je při vyhodnocení modelací variabilnější a nabízí účelnější funkcionalitu, jelikož umožňuje nejen zobrazení výsledků dle přednastavených hodnotících koncentrací, ale umožňuje i zadání vlastních hodnot. Standardně tento nástroj pracuje s hodnotami IDLH, AEGL, ERPG a PAC u výpočtu šíření a disperze těžkých plynů v prostředí. Zadáním vlastních hodnot lze do tohoto nástroje zanést přednastavené hodnoty z nástroje TerEx či například uvedené hodnotící koncentrace pro jinou dobu expozice než 60 minut, která je zde přednastavena. ALOHA pracuje při vyhodnocení modelací zejména na principu vykreslení zón kontaminace, případně vytvoření grafu vývoje koncentrace látky proti časové ose v konkrétním nastaveném bodě v zóně úniku. Neumožňuje tedy přímo vytvoření obdobného grafu jako nástroj TerEx, který by bylo možné přímo komparovat. Z tohoto důvodu byly při jednotlivých modelacích vybrány relevantní vzdálenosti od zdroje úniku, na kterých lze prezentovat vývoj vypočtené koncentrace látky v prostoru. Konkrétně se jedná o oblast blízkého pole do 100 m od zdroje úniku, oblast střední vzdálenosti do 200 m a oblast vzdáleného pole do 1 000 m a více. Tyto vzdálenosti byly následně zadány do nástroje ALOHA pro výpočet

koncentrace látky v daném bodě nacházejícím se ve střední ose úniku. V nástroji TerEx byla koncentrace pro tyto body odečtena z vytvořeného grafu. Proces lze aplikovat i obráceným postupem pro zjištění, v jaké vzdálenosti od zdroje úniku se bude nacházet určitá koncentrace látky. Dále byly na základě určených hodnotících koncentrací látky oběma nástroji komparovány vzdálenosti, do kterých byl vypočten dosah látky ve zvolené koncentraci, konkrétně koncentrace AEGL/PAC 2, 3 a hodnota IDLH. V rámci komparace výsledků modelací byl sledován rozdíl mezi výsledky modelací obou nástrojů, přičemž byla jako hranice významnosti rozdílu zvolena hodnota 10 %, která vychází z obecné statistiky a bývá používána pro označení statisticky vysoce významného rozdílu [100].

Výsledky modelací obou softwarových nástrojů byly následně podrobeny komparaci s reálnými dopady modelovaných havárií, přičemž byl sledován zejména dokumentovaný dosah látky v prostředí v zaznamenané nebo odvoditelné koncentraci. Predikci koncentrace látky v prostředí lze orientačně provést i na základě viditelnosti hustého oblaku těžkého plynu, který obecně značí koncentraci látky převyšující 10 000 ppm [60, 61]. Při komparacích bylo z kvalitativního pohledu sledováno, do jaké míry odpovídají výsledky modelací zvolených softwarových nástrojů a jejich matematických modelů reálným podmínkám vybraných havárií. Výsledky této části práce lze aplikovat při přibližném určení validity modelací šíření těžkých plynů v atmosféře při použití modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx a modelu Heavy Gas nástroje ALOHA. Dále lze určit, který z nástrojů vykazuje vyšší přesnost modelací při porovnání s reálnými dopady vybraných chemických havárií. Na základě výsledků této kvalitativní analýzy limitovaného rozsahu a teoretického studia dané problematiky je možné obecně doporučit, k jakým účelům jsou softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu vhodné a jaký je jejich možný způsob využití. Tato část práce je tedy zaměřena na aplikovatelnost modelací chemických havárií s šířením těžkého plynu v atmosféře v rámci chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a možného využití složkami IZS.

5 VÝSLEDKY

Tato kapitola shrnuje výsledky experimentálního šetření realizovaného v rámci projektu DEGAS. Dále prezentuje komparativní modelace tohoto experimentu prostřednictvím modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx a modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA. Následně jsou analyzovány vybrané chemické havárie, jejichž dopady byly modelovány prostřednictvím uvedených softwarových nástrojů a výsledky modelací jsou komparovány navzájem a s reálnými dopady chemických havárií. Na základě výsledků je stanoven soubor doporučení k využití softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí v atmosféře ve formě těžkého plynu. Tato doporučení jsou zaměřena na praktické využití a interpretaci výsledků modelací v rámci chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a využitelnosti záchrannými složkami při plánování či realizaci záchranných a likvidačních prací.

5.1 Výsledky experimentálního šetření a terénních experimentů projektu DEGAS

Projekt DEGAS byl realizován v rámci několika fází. První byla zaměřena na studium problematiky šíření a disperze těžkých plynů v atmosféře a možnosti modelace tohoto jevu, včetně návrhu řešení vhodného matematického modelu. Dále na přípravu experimentálního šetření určeného k ověření chování těžkého plynu v atmosféře. Na základě této části byl vytvořen koncept terénních experimentů a stanovena jejich základní metodika. Druhá fáze byla zaměřena na realizaci dvou terénních experimentů s cílem ověřit chování těžkého plynu v atmosféře a verifikovat navržené řešení modelace šíření těžkých plynů. Výzkumná část disertační práce přímo vychází z výsledků tohoto projektu, na který byla navázána v rámci zadání rámcového tématu a dále tento projekt rozšiřuje o zkoumání validity jeho výstupů a softwarových modelací šíření těžkých plynů v atmosféře. Hlavním výstupem projektu bylo vytvoření softwarového modulu DEGAS, který je součástí expertního softwarového nástroje TerEx. Tento modul je určený k modelování rozptylu a šíření těžkého plynu v atmosféře za různých podmínek, přičemž umožňuje na základě řady vstupních parametrů predikovat možný dosah nebezpečných koncentrací plyných látek a disperzí těžších vzduchu v prostředí.

První experimentální šetření bylo realizováno ve dnech 24. až 26. 10. 2016, přičemž samotný experiment byl realizován po několikadenních přípravách v poslední uvedené datum v dopoledních hodinách. Přípravy spočívaly v rekognoskaci testovací plochy, náviku dispozičního postavení jednotlivých prvků a technických prostředků experimentu, včetně příprav a kalibrace detekčních přístrojů. Jako zdroj úniku zvoleného stopovače sloužilo pět svazků tlakových lahví v příslušném rozestavení po dvanácti tlakových lahvích s celkovým objemem 2 250 kg látky. V rámci příprav byly svazky lahví umístěny dle předem definované geometrie a proběhla zkušební vizualizace šíření plynu v prostředí, přičemž byla testována i vizuální záznamová zařízení. Jako vhodný plyn byl pro experimentální účely zvolen oxid uhličitý, který vykazoval základní požadované vlastnosti. Jedná se o plyn s nízkou mírou toxicity, respektive se jeho toxicita na člověka projevuje až při expozici vysokým koncentracím, v řádu jednotek tisíc ppm. Dále je z pohledu fyzikálních vlastností vhodný, jelikož je relativně snadno detekovatelný a měřitelný pomocí dostupných a cenově nenáročných detekčních přístrojů. Vzhledem k jeho molekulové hmotnosti se jedná o látku těžší vzduchu, přibližně 1,52krát, která je za standardních podmínek v plynném stavu o hustotě 1,87 mg/m³ při 15 °C. Tato látka je snadno zkapalnitelná pomocí tlaku a má tedy při úniku vlastnosti těžkého plynu. Při vyšších koncentracích vytváří okem viditelnou směs plynu a aerosolu, která umožňuje sledovat a zaznamenávat šíření oblaku těžkého plynu. Podstatná je i jeho dobrá dostupnost v ČR a možnost získání a využití pro vědecko-výzkumné účely. Základní vlastnosti této chemické látky jsou uvedeny v tabulce 7.

Tabulka 7: Výbrané vlastnosti oxidu uhličitého [52, 53]

| Oxid uhličitý / vlastnosti | Hodnoty |
|----------------------------|--|
| Identifikace, UN / CAS | 1013 / 124-38-9 |
| Molekulová hmotnost | 44 |
| Bod tání | -78,5 °C |
| Toxicita | Nízká |
| IDLH | 40 000 ppm |
| PEL, NPK-P | 9 000 mg/m ³ (5 000 ppm), 45 000 mg/m ³ (25 000 ppm) |

Experiment byl naplánován na 26. 10. 2016 v přibližném čase 8:30 až 9:30 hod. V této době byl zahájen přípravami testovací plochy, rozmístěním a zprovozněním detekčních přístrojů a zajištěním příslušného zázemí. Uvedený čas byl zvolen jako vhodný z pohledu predikce meteorologických podmínek na základě předchozího studia předpovědi meteorologické situace pro danou lokalitu z veřejně dostupných zdrojů a konzultací s pracovištěm meteorologické služby AČR. Veškeré činnosti probíhaly v souladu s časovým harmonogramem a stanovenou metodikou. Výpustě svazků tlakových lahví byly otevřeny v rychlém sledu v 9:17 hod a v iniciálních fázích byl patrný značný výron unikajícího plynu na testovací ploše, který se v souladu s kinetikou vypuštěné látky a panujícími meteorologickými podmínkami šířil ve směru rozmístěných detekčních přístrojů. Na základě vlastností látky a dynamiky úniku z tlakových zásobníků se jednalo o únik typu JET, kdy docházelo k okamžitému odparu látky ze zdroje a její šíření ve formě těžkého plynu tvořeného po určitou vzdálenost viditelnou směsí plynu a aerosolu. Samotný únik se v závislosti na snižování tlaku uvnitř tlakových lahvích zmenšoval a po 75 minutách, v 10:32 hod, byly všechny svazky manuálně uzavřeny. V rámci bezpečnosti byl experiment zakončen po dalších 10 minutách, aby proběhlo úplné odvětrání experimentálního prostoru a vstup do něj byl bezpečný. V průběhu experimentu a po jeho skončení bylo na tlakových lahvích patrné jejich výrazné zchlazení z důvodu uvolnění tlaku uvnitř a byla na nich vytvořena zhruba centimetrová námraza kondenzované vlhkosti vzduchu. Tento jev byl potvrzen i snímáním termokamerou, kdy dle měření dosahovala teplota lahví hodnot až přibližně $-15\text{ }^{\circ}\text{C}$. Na závěr experimentu byla provedena dodatečná vizualizace proudění vzduchu a plynu pomocí speciální pyrotechnické dýmové náložky. Po úklidu testovací plochy a sbalení použité techniky bylo šetření zakončeno předáním prostoru příslušníkům AČR a odjezdem účastníků experimentu v 15:20 hod. Panující meteorologické podmínky v době experimentu byly 8 až $9\text{ }^{\circ}\text{C}$, rychlost větru se pohybovala okolo 2 m/s, obloha byla zatažená a kvůli deštivému počasí v předchozích dnech byla zvýšená vlhkost vzduchu [60].

Uvedený experiment byl ověřovacího charakteru a jeho cílem bylo zejména prověřit a odladit metodiku před přípravami druhého experimentu. Dále prověřit možnosti realizace experimentu v daných podmínkách a nároky jeho kompletního zabezpečení. Cílem prvního experimentálního šetření bylo zejména ověřit následující body:

- vhodnost navržené metodiky a spolehlivost zvoleného stopovače, včetně jeho logistického zajištění a vhodnosti skladovacího zařízení, ze kterého bude následně vypuštěn, včetně zjištění nejvhodnějšího způsobu manipulace a možnosti vypuštění stopovače;
- chování zvoleného stopovače v prostředí za reálných podmínek a při samotném úniku, jestli bude oblak těžkého plynu reálně okem viditelný a jestli se nebude únikový otvor ucpávat námrazou při úniku plynu;
- vhodnost zvolených detekčních přístrojů pro měření koncentrace stopovače v čase a prostoru, zejména jejich detekční limity;
- zjistit, jestli budou k účelu monitorace a záznamu experimentu vhodné použité termokamery a dron se záznamovým zařízením;
- vhodnost prostoru vojenského letiště Bechyně pro provedení experimentů, možnost spolupráce a personální i technické asistence AČR;
- nejvhodnější dispoziční využití daného prostoru a rozestavení jednotlivých detekčních přístrojů, včetně určení vhodné oblasti pro technické zázemí [60].

Na základě realizovaného experimentálního šetření lze konstatovat, že zvolená metodika se fundamentálně prokázala jako vhodná a vyhovující s nezbytností drobných úprav a nastavení pro realizaci druhého experimentu. Koncepce sekundárního experimentu byla mírně odlišná od prvního, kdy bylo plánováno uskutečnění simulace úniku z automobilové cisterny z jednoho bodu. Zvolený stopovač se prokázal jako vyhovující. Při úniku dle předpokladů tvořil oblaka těžkého plynu, která byla ve vyšších koncentracích viditelná pouhým okem, a tudíž bylo možné šíření oblaku v blízkosti zdroje úniku vizuálně monitorovat a zaznamenávat. Svazky tlakových lahví byly pro prvotní experiment dostačující. Způsob a úroveň vypouštění plynu byla adekvátní a při samotném úniku nedošlo k žádným komplikacím, ucpání únikových otvorů zmrazky ani ke komplikacím jiného charakteru. Zvolené detekční přístroje se prokázaly jako vyhovující a všechny nepřetržitě fungovaly a zaznamenávaly koncentraci látky dle jejich možností a detekčního rozsahu po celou dobu experimentu. Udávaný detekční rozsah přístrojů, 5 000 až 6 000 ppm, byl experimentálně ověřen jako efektivně překročitelný až do úrovně, která přesahovala maximální koncentraci udávanou výrobcem, 10 000 ppm, o zhruba 10 %. První umístěný detekční přístroj v blízkosti zdroje úniku byl nad očekávání funkční po celou dobu experimentu a nedošlo u něho k sebemenšímu poškození. V lokalitě jeho umístění byla předpokládaná koncentrace látky v řádu desítek

tisíc ppm a bylo rovněž předpokládáno výraznější snížení teploty vzduchu z důvodu vzniku Joule-Thomsonova jevu při úniku látky, jež byl ze všech svazků směřován právě k tomuto detektoru. Nedostatkem a zásadním podnětem pro přípravu druhého experimentu byl nedostatečný počet detekčních přístrojů, které nebyly schopny obsáhnout celou plochu úniku látky. Viditelný oblak plynu byl v iniciálních fázích pozorovatelný až do vzdálenosti přibližně 25 m od zdroje úniku.

Pro možnost video záznamu a monitorace experimentu se prokázala jako nejvhodnější standardní digitální záznamová zařízení, která byla schopna zaznamenávat viditelnou fázi unikajícího plynu a celkový průběh experimentu. Jako vhodné a užitečné se ukázalo použití dronu, který byl schopen průběh experimentu zaznamenávat z ptačí perspektivy i nestandardních úhlů, čímž dopomohl k získání unikátního nadhledu na dynamiku, tvorbu a šíření viditelné fáze oblaku těžkého plynu v prostředí. Jako nevhodné se prokázaly použité termokamery značky Flir systems, jelikož nebyly schopny detekovat a měřit teplotu tvořícího se oblaku těžkého plynu a umožňovaly pouze sledovat změnu teploty jednotlivých tlakových lahví. Vzhledem k dostupnosti termokamer a jejich potencionálním pořizovacím nákladům bylo od tohoto konceptu a jejich použití pro následující experiment upuštěno. Pro účely druhého experimentu byl počet kamer navýšen s cílem využít možnosti záznamu z různých úhlů a pozic, ve kterých lze předem nastavené kamery bez nutnosti lidské obsluhy umístit, a to v přiměřené vzdálenosti i na místa, která mohou být vystavena vyšším koncentracím unikajícího plynu. Vhodnost prostoru vojenského letiště Bechyně se prokázala jako dobrá a příslušný útvar AČR byl pro experimentální účely schopen vyčlenit celý prostor letiště, včetně zajištění požadované technické a personální spolupráce. Zvolené dispoziční uspořádání experimentu se rovněž prokázalo jako vyhovující a z pohledu bezpečnosti experimentu vhodné. Pro realizaci druhého bylo nezbytné vzhledem k jeho plánovanému rozsahu úměrně rozšířit vytyčenou testovací plochu, a to i s přihlédnutím k bezpečnosti experimentu.

Druhé experimentální šetření bylo realizováno ve dnech 10. až 12. 4. 2017. Jeho předmětem bylo provedení samotného „ostrého“ experimentu projektu DEGAS a příslušných měření. Lokalita byla totožná s prvním experimentem a celkový harmonogram byl obdobný. V prvních dnech probíhaly přípravné práce, celkový nácvik jednotlivých činností před uskutečněním hlavního experimentu a příprava časového

plánu. Námětem pro druhý experiment byla nehoda automobilové cisterny převážející zkapalněný, stlačený plyn, který bude při havárii unikat skrze relativně malý otvor a při úniku bude vytvářet oblaka těžkého plynu šířící se v prostředí. Podstatou byl únik látky z horizontálního cylindrického zásobníku a monitorace její následné disperze v atmosféře. Tento proces simuluje reálnou nehodu či provozní havárii s unikem těžkého plynu, kterou lze následně simulovat pomocí modelačních softwarových nástrojů. Samotný experiment také posloužil k doladění a verifikaci výsledků modelace pomocí modulu DEGAS a jeho matematického modelu, který vznikl jako výstup projektu a je součástí expertního softwarového nástroje TerEx.

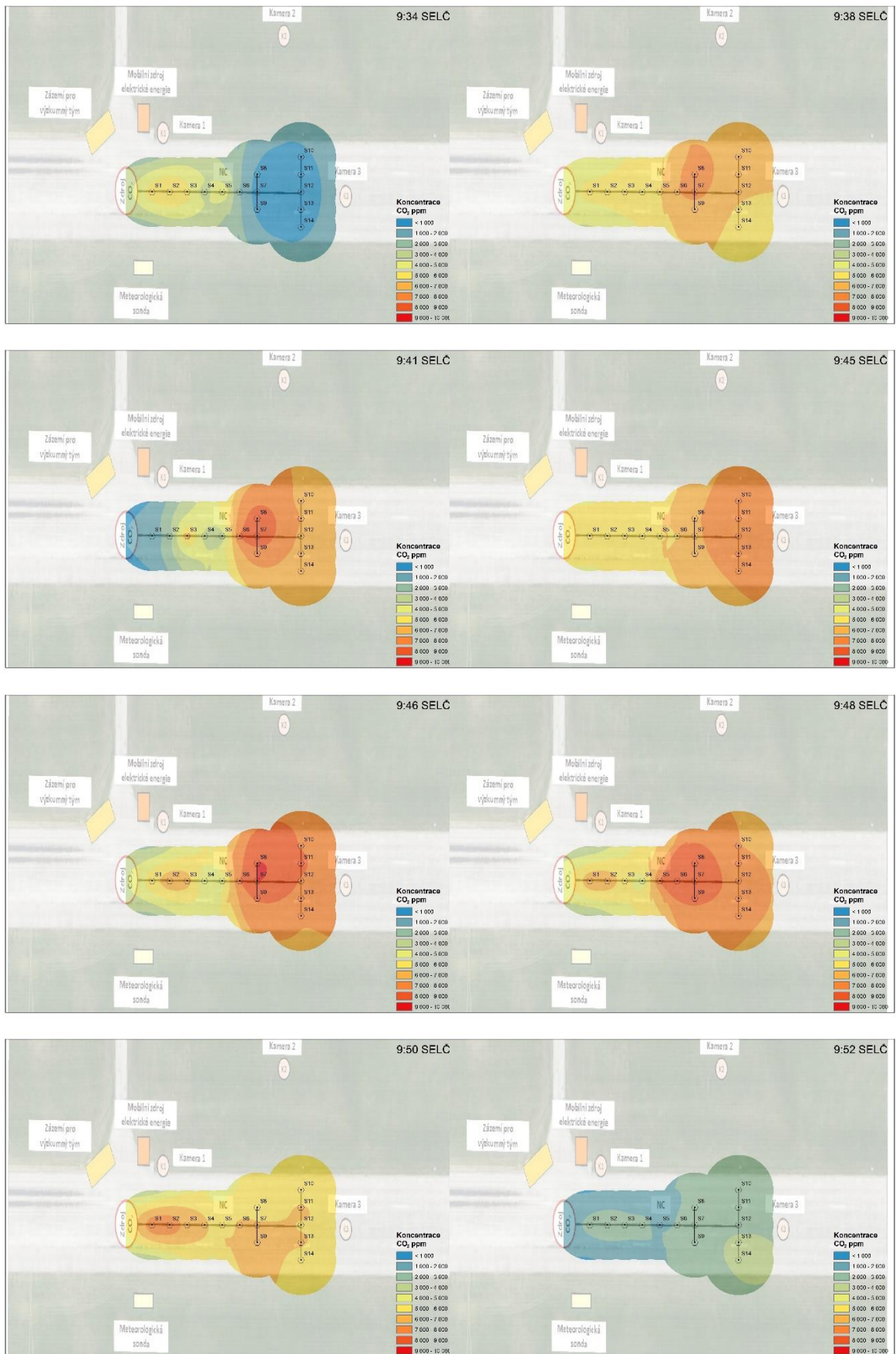
V rámci přípravných prací proběhlo umístění zdroje úniku, pro který byl zvolen horizontální cylindrický tlakový zásobník o objemu 6 tun zkapalněného oxidu uhličitého, který byl použit jako stopovač pro následné měření. Tlak látky uvnitř zásobníku byl po jeho naplnění 18 bar. Zásobník byl vzhledem k předpovědi počasí a předpokládanému proudění větru umístěn opačným směrem než při předchozím experimentu. Samotné umístění zásobníku na testovací plochu, jeho naplnění kapalným oxidem uhličitým, nastavení techniky zásobníku, instalace výpusti a zaškolení obsluhy k otevření a uzavření zásobníku, proběhlo dne 11. 4. Dále byla vytyčena celá experimentální plocha a viditelně označena pro zajištění bezpečnosti experimentu. Součástí příprav byl rovněž nácvik práce s detekčními přístroji, jejich cvičné rozmístění a kalibrace. Na základě prvního experimentu byl počet detekčních přístrojů adekvátně rozšířen pro pokrytí měření na větší ploše a oblasti předpokládaného šíření těžkého plynu. Použité detekční přístroje byly stejného typu jako při prvním experimentu a byly doplněny o měřicí stanoviště pro měření charakteristiky tvořeného aerosolu v oblaku těžkého plynu. Zde byl rovněž umístěn dodatečný detekční přístroj jiného typu pro měření koncentrace oxidu uhličitého, viz metodika experimentu. Experiment byl zaznamenáván pomocí vhodně rozmístěných digitálních kamer a dronu. Celkem byly k záznamu experimentu použity tři kamery a uvedený dron s kamerou. Dále byla zajištěna plná spolupráce s dotčeným útvarem AČR, který zabezpečil dodávku elektrické energie pomocí mobilní elektrocentrály, meteorologické měření a pro zajištění dodatečné bezpečnosti rovněž hasičské družstvo. Uvedené družstvo se dále podílelo na otevření a poté i uzavření ventilu výpustě zásobníku. Stanovené cíle druhého experimentálního šetření byly následující:

- simulovat průběh nehody automobilové cisterny převážející zkapalněný, stlačený plyn s jeho následným únikem do prostředí, který se bude šířit ve formě těžkého plynu;
- provedení měření koncentrace unikajícího plynu v čase a prostoru, včetně záznamu panujících meteorologických podmínek a dalších hodnot;
- sběr a příprava dat k následnému vyhodnocení, doladění modulu DEGAS a tvorbě grafických map šíření oblaku těžkého plynu v prostoru při sledování časových změn;
- příprava podkladů k provedení komparativních a verifikačních modelací pomocí vybraných modelačních softwarových nástrojů a matematických modelů [60].

Na základě stanoveného harmonogramu bylo hlavní experimentální šetření projektu DEGAS uskutečněno 12. 4. 2017. Dle předchozího studia meteorologické předpovědi na uvedené datum byl čas experimentu z důvodu možných proměnných podmínek stanoven na dopoledne, přibližně mezi 9 a 11 hod, kdy mělo panovat ideální počasí pro jeho realizaci. Experimentální šetření bylo dle stanoveného harmonogramu a metodiky zahájeno v ranních hodinách přípravami, rozmístěním a zprovozněním detekčních přístrojů, video záznamových zařízení a zajištěním elektrické energie pomocí mobilního agregátu. Dále byl připraven prostor zázemí, kde byl rovněž z důvodu monitorace situace a bezpečnosti umístěn jeden detekční přístroj, který nebyl součástí realizovaných měření. Na základě vydání pokynu byl experiment zahájen v 9:34 hod otevřením příslušného ventilu připravené výpustě zásobníku. Tento úkon provedli příslušníci hasičské jednotky AČR, kteří byli vybaveni příslušnými ochrannými prostředky. Samotný test trval 16 minut, kdy po uplynutí této doby došlo k vyčerpání kapalné fáze látky a poklesu tlaku uvnitř zásobníku. Oblak plynu byl viditelný do vzdálenosti nejméně 80 metrů, v iniciální fázi experimentu až zhruba do 150 metrů. Po uvedené době došlo k manuálnímu uzavření zásobníku. Po úklidu testovací plochy a sbalení použité techniky bylo šetření zakončeno předáním prostoru příslušníkům AČR a odjezdem účastníků v 11:45 hod. Při tomto experimentu panovaly ideální meteorologické podmínky k jeho provedení, nízká teplota v rozmezí 7 až 9 °C, bez srážek, téměř bezvětrí a oblačno. Vlhkost vzduchu byla v rozmezí 58 až 93 %, rychlost větru v nadzemní vrstvě do 1 m/s ve směru orientace experimentu a třída stability atmosféry dle Pasquill-Giffordovy-Turnerovy typizace D [60]. Fotodokumentace z obou experimentů je uvedena v příloze 1.

V rámci vyhodnocení druhého terénního šetření a stanovených cílů lze konstatovat, že experiment dopadl úspěšně a jednotlivé cíle byly splněny. Simulace nehody automobilové cisterny proběhla bez komplikací. Dle očekávání vytvářel unikající plyn oblaka těžkého plynu, která se ve vyšších koncentracích a ve viditelné fázi šířila v očekávané zóně, kde byly rozmístěny detekční přístroje v metodicky určeném schématu. Detailně byly zaznamenány zejména hodnoty koncentrace šířící se látky v čase a prostoru. Kontinuálně byly také zaznamenávány přesné meteorologické podmínky na testovací ploše poblíž zdroje úniku prostřednictvím meteorostanice AČR. Tyto hodnoty byly následně využity k vytvoření modelací daného experimentu pomocí vybraných modelačních softwarových nástrojů, přičemž byla použita reálná a přesná data.

Na základě jednotlivých měření a jejich následném vyhodnocení byla vytvořena série map vyobrazující šíření látky v čase a prostoru. Vybrané mapy vyobrazující šíření látky jsou uvedeny na obrázku 9. Tyto mapy ovšem z technických důvodů neukazují přesné hodnoty koncentrace látky v prostředí. Nedostatky byly dány typem použitých detekčních přístrojů, měřicí metodou a dynamikou šíření těžkého plynu v experimentálním prostředí. Hlavním nedostatkem byl detekční rozsah použitých přístrojů, který byl 10 000 ppm. Reálně je tento rozsah o něco vyšší, ale výrazně se snižuje přesnost měření. Dle použitého typu detekční metody NIDR dochází při překročení detekční hranice k přehlcení senzoru znemožňující měření vyšších koncentrací, ale měření probíhají nadále. Celková odhadovaná nepřesnost měření při experimentu byla 10 %. Z pohledu účelu experimentu se jedná o akceptovatelnou hodnotu, jelikož je výrazně nižší než odhadovaná přesnost softwarových modelací daného jevu [60]. Z map je rovněž patrná dynamika šíření těžkého plynu v atmosféře. Při tomto procesu se uplatňuje do určité vzdálenosti od zdroje úniku aktivní šíření látky z důvodu její kinetické energie vzniklé při uvolnění látky a poklesu jejího tlaku. Dále se látka šíří v menších shlucích podléhajících turbulentním jevům, které tvoří celkový oblak těžkého plynu a v procesu šíření se vyskytují fluktuační koncentrace látky v čase a prostoru. Na tento proces mají taktéž zásadní vliv panující meteorologické podmínky. Podstatnou roli zde má i pokles tlaku uvnitř zásobníku v průběhu času, který způsobuje postupné omezení úniku. Obecně se jedná o jevy, které jsou z pohledu softwarových modelací šíření těžkých plynů v prostředí složitě řešitelné a jedná se o jeden z jejich nedostatků.



Obrázek 9: Vyobrazení šíření stopovače těžkého plynu v čase a prostoru při druhém experimentu projektu DEGAS [60]

Z provedených observací a znalosti způsobu šíření těžkých plynů v prostředí, včetně možnosti jejich softwarové modelace, lze konstatovat, že koncentrace látky v blízkosti zdroje úniku musela být výrazně vyšší, než jaká byla při experimentu měřena. Odhadovaná koncentrace v blízkosti zdroje úniku byla v řádu stovek tisíc ppm, což je vysoce za hranicí detekčních schopností použitých detekčních přístrojů. V oblasti poslední řady detektorů, 100 m od zdroje úniku, byla odhadována koncentrace v řádu desítek tisíc ppm. V prostoru viditelného šíření oblaku plynu lze dle fyzikálních vlastností látky odhadovat její koncentraci vyšší než 10 000 ppm. V iniciačních fázích experimentu byla viditelná oblast vytvořeného oblaku těžkého plynu až do vzdálenosti zhruba 150 m. Z těchto důvodů bylo nezbytné naměřená data korigovat a upravit, aby bylo možné vytvořit realistický odhad koncentrace, která se v prostoru mohla vyskytovat. Ke korekci hodnot byly použity naměřené hodnoty a dvě orientační modelace v softwarovém nástroji ALOHA s cílem vytvořit odhad koncentrace látky v blízkém poli úniku. Pro první modelaci byly použity reálné hodnoty a rozměry zásobníku i únikového otvoru a pro druhou modelaci byla použita dopočítaná průměrná rychlost úniku. Na základě porovnání výsledků byl stanoven koeficient, který byl použit k přepočtu a korekci naměřených hodnot. Výsledný odhad koncentrace v blízkém poli na ose x ve střední ose směru šíření látky je uveden v tabulce 8. Tyto hodnoty byly rovněž použity k doladění modulu DEGAS a ke zpřesnění výpočtu distribuce koncentrace látky a její disperze v blízkém poli. Je však nezbytné si uvědomit, že únik stlačeného plynu z tlakové nádoby či zásobníku, je dynamický děj a rychlost úniku není konstantní. S poklesem tlaku uvnitř zásobníku a snížením teploty v důsledku rozpínivosti plynu vedoucím rovněž ke zvýšení hustoty látky, dochází k pozvolnému snižování rychlosti úniku a k průběžnému poklesu koncentrace látky v prostoru.

Tabulka 8: Odhad koncentrace stopovače těžkého plynu při experimentálním úniku v blízkém poli [60]

| Vzdálenost od zdroje úniku (m) | Hodnota koncentrace látky (ppm) |
|--------------------------------|---------------------------------|
| 15 | 589 000 |
| 25 | 394 000 |
| 35 | 253 000 |
| 45 | 166 000 |
| 55 | 117 000 |
| 65 | 80 000 |
| 75 | 60 000 |
| 100 | 25 000 |

5.1.1 Vymezení modulu DEGAS

Jedním z hlavních výstupů projektu DEGAS bylo vytvoření stejnojmenného modulu, který byl implementován do modelačního softwarového nástroje TerEx. Uvedený modul a jeho pojmenování vychází ze zkratky „Dense Gas” označující těžký plyn. Modul DEGAS je určený k modelaci úniku, šíření a disperze těžkého plynu v atmosféře. Základem modulu je matematický model SLAB, který patří mezi středně komplexní modely či modely mělkých, smíšených vrstev. Svým základem rovněž vychází z BOX modelů. Tento model umožňuje modelovat jednorázový i kontinuální únik látky a šíření těžkého plynu v atmosféře, včetně možného odparu látky z kaluže kapaliny. Při kontinuálním úniku typu JET umožňuje kalkulovat s únikem látky ze zdroje v horizontální i vertikální ose a šíření oblaku těžkého plynu je ve zjednodušené podobě znázorňováno jako pohyb desky ve směru vanutí větru. Celkově vychází tento model ze zjednodušeného vnímání meteorologických a terénních podmínek a jedná se o model jednorozměrný. V rámci výpočtu bere v potaz i působící gravitační sílu, turbulentní promíchávání vzduchu, difúzi, efekt tření šířícího se oblaku o zemský povrch a meteorologické podmínky [56, 59, 60].

Model SLAB provádí výpočet šíření a disperze oblaku těžkého plynu na základě řešení šesti jednorozměrných bilančních rovnic, přičemž je schopen vypočítat i základní geometrické vymezení oblaku těžkého plynu v prostředí a jeho koncentrační profil. Bilanční rovnice počítají konkrétně bilanci unikající látky, hmoty, tepla a hybnosti v ose

x, y, z v čase. Parametr bilance tepla zohledňuje rozdílnost teplot oblaku těžkého plynu a zemského povrchu, který má vliv na hustotu oblaku a ve specifických případech se uplatňuje při výpočtu rychlosti disperze látky v prostředí a má vliv i na její maximální dosah. Parametr hybnosti je využíván k výpočtu rychlosti šíření látky a působení gravitačních sil, které jsou uplatňovány u látek těžších vzduchu. Na základě řešení uvedených bilančních rovnic jsou výsledné hodnoty prostorově průměrovány a blíže upraveny dle vstupních parametrů úniku. Pro jednorázový únik je distribuce koncentrace po úniku brána jako rovnoměrná ve všech osách a následně počítána v prostoru, přičemž jsou bilanční rovnice v tomto případě funkcí času. Pro kontinuální únik je distribuce koncentrace brána jako proměnná ve směru větru a bilanční výpočet je v tomto případě funkcí místa. V návaznosti na bilanční rovnice je vypočítána geometrie oblaku těžkého plynu, v rámci které je vypočtena polovina šířky oblaku, její tvar a výška. V dalším bodě je vypočtena koncentrace látky uvnitř oblaku těžkého plynu a její distribuce, která je vypočtena na základě koncentračních funkcí, parametrů oblaku a celkové hmotnosti uniklé látky. Pro koncentrační funkce je směrodatná vzdálenost od zdroje úniku, parametry zdroje úniku a charakteristika okolního terénu. Pro zpřesnění výsledků a výpočtů modelace prostřednictvím modulu DEGAS byl pro koncentrační funkce navíc stanoven disperzní koeficient, který je závislý na vzdálenosti od zdroje úniku. Tento koeficient byl stanoven na základě série modelací úniku 24 látek prostřednictvím matematických modelů SLAB v neupravené verzi, modelu PLUME softwarového nástroje TerEx, Gaussovského modelu a modelu Heavy Gas nástroje ALOHA. Vstupní parametry byly pro všechny modelace totožné a hodnoceny a komparovány byly koncentrace látek v určených vzdálenostech od zdroje úniku. Při stanovení uvedeného koeficientu byly rovněž využity observace a výsledky měření získané v rámci provedeného experimentálního šetření projektu DEGAS a modul DEGAS by tak měl poskytovat realistické výsledky predikce šíření těžkého plynu a jeho disperze v atmosféře [60].

Při kontinuálním úniku, ke kterému dochází v důsledku odparu kapaliny z kaluže, model předpokládá, že se látka v iniciální fázi nachází při teplotě varu a plocha tvořeného oblaku se rovná ploše kaluže. Při horizontálním úniku typu JET je uvažován dvoufázový únik, přičemž v iniciální fázi je ve zdroji úniku přítomna i kapalná fáze látky a následně dochází k fázovému přechodu a tvorbě unikajícího plynu v druhé fázi. Charakteristika zdroje úniku je v rámci výpočtu zjednodušena ve formě, kdy látka uniká směrem

k povrchu země a lokalizace zdroje odpovídá směru šíření větru. Ve výpočtu tedy nelze stanovit směr únikového otvoru, vyjma případného směru vzhůru. Při uvedeném typu úniku je do výpočtu zanesena i výška zdroje úniku nad zemí, která je stěžejní při vertikálním směřování úniku. Plocha vytvořeného oblaku a jeho teplota je vypočítána na základě teploty a tlaku látky v zařízení a teploty okolí. Samotný výpočet lze aplikovat u látek, které jsou zkapalněny pomocí stlačení a unikají ve formě dvoufázového úniku. Lze jej rovněž aplikovat i u látek zkapalněných pomocí uvedení látky pod bod varu, přičemž v rámci zjednodušeného fyzikálního popisu je v tomto případě předpokládáno, že při úniku se bude teplota látky rovnat teplotě jejího varu. Alternativně lze model SLAB použít pro modelaci rozptylu směsi kapalin v atmosféře, přičemž bere v úvahu termodynamické procesy, které se v tomto případě uplatňují. Dalším podstatným údajem modelace s využitím daného modelu je parametr stability atmosféry, který je stanoven na základě určení třídy stability atmosféry dle Pasquill-Giffordovy-Turnerovy typizace. Na jejím základě je stanovena konstanta ovlivňující finální výpočet velikosti tvořeného oblaku těžkého plynu. V rámci modelace je také uvažován vliv horizontálního i vertikálního mísení okolního vzduchu turbulentním mechanismem s oblakem těžkého plynu a tření uvnitř oblaku, které vzniká při jeho šíření v prostředí. Třecí síly jsou však vytvářeny i v důsledku působení zemského povrchu a okolního vzduchu na šířící se oblak těžkého plynu, zejména v horní části oblaku [60].

5.1.2 Popis funkcionality modulu DEGAS a jeho integrace v softwarovém nástroji TerEx

Jak již bylo uvedeno výše, vytvořený modul DEGAS je součástí expertního softwarového nástroje TerEx a slouží k modelaci dopadů chemických havárií s únikem nebezpečných látek a směsí ve formě těžkého plynu. Na základě řady vstupních parametrů modeluje šíření, dosah a disperzi oblaku těžkého plynu v atmosféře. Základní funkcionality a uživatelské rozhraní vycházejí z podmínek uvedeného softwarového nástroje a modul DEGAS je integrován jako jeden z havarijních modelů. Samotný nástroj je dostupný v desktopové verzi, ale v rámci jeho rozvoje a integrace modulu DEGAS byla vytvořena nová platforma, která využívá webové rozhraní a softwarový nástroj je uložen na dedikovaných serverech. Základními havarijními modely tohoto nástroje jsou modely PLUME a PUFF pro modelaci jednorázového nebo kontinuálního úniku vroucí kapaliny s okamžitým odparem do oblaku, dvoufázový únik, nebo pro únik kapaliny s následným odparem látky z kaluže. Dále disponuje modely JET FIRE, POOL FIRE a BLEVE.

Z pohledu modelací se jedná o standardní modely používané při modelaci možných následků chemických havárií. Z alternativních modelů disponuje nástroj TerEx modely EXPLOSIVE pro modelaci následků exploze různých typů výbušnin, například při použití nástražného výbušného systému, a modelem SPREAD simulujícím rozptyl a šíření prachových částic anorganických a radioaktivních látek, například při použití tzv. špinavé bomby. Posledním modelem je uvedený modul DEGAS, který oproti výše uvedeným modelům úniku a šíření nebezpečných chemických látek a směsí využívá jiný matematický základ a umožňuje komplexnější přístup k modelacím s dosažením kvalitnějších výsledků při modelaci šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře [101].

Pro tvorbu modelace s využitím modulu DEGAS je nezbytné zadat řadu vstupních parametrů. Softwarový nástroj TerEx je z uživatelského pohledu řešen co nejjednodušeji a uživatele návodným způsobem vede k zadání požadovaných hodnot, přičemž jsou v rámci jednotlivých parametrů přednastaveny limity a chybová oznámení, která uživatele upozorní na zadání nevalidní hodnoty. Při zadávání hodnot jsou k dispozici dialogová okna s vysvětlivkami a popisy. Jelikož je tento nástroj řešen formou „vše v jednom“, disponuje vlastní databází chemických látek a směsí, ze které je při modelaci možno vybírat. Tato databáze čítá 1014 často používaných chemických látek, směsí a nebezpečných materiálů, včetně popisu jejich fyzikálně chemických a havarijních vlastností. Dále dle uvedeného principu disponuje uvedený nástroj vlastním rozhraním pro vyhodnocení výsledků modelací, funkcí tvorby grafů a možností zadání vypočtené zóny kontaminace na mapový podklad. K vizualizaci výsledků v prostředí je využito mapového podkladu OpenStreetMap [60, 101].

Výsledky modelací jsou shrnuty v textové formě, ve které jsou uvedeny vstupní parametry, výsledky výpočtu a typ stopy symbolizující výsledky výpočtu v grafické podobě. Výsledky výpočtu uvádějí vzdálenost ohrožení osob toxickou látkou od zdroje úniku a vzdálenost pro doporučený průzkum koncentrace plynu. První uvedená vzdálenost vychází z koncentrace PAC-3 nebo AEGL-3 a udává oblast, ve které lze předpokládat závažné zdravotní následky u zasažených osob, které mohou vést k rozvoji nevratných dopadů intoxikace a ohrozit jedince na životě. Druhá uvedená vzdálenost vychází z koncentrace PAC-2 nebo AEGL-2 a udává oblast, ve které lze předpokládat závažné zdravotní následky u zasažených osob, které mohou vést k rozvoji vážných až nevratných následků intoxikace. Použité jednotky pro výsledné koncentrace látky jsou

mg/m³. Zóna ohrožení toxickou látkou je graficky znázorněna kružnicí a zóna ohrožení osob toxickou látkou je znázorněna výsečí z kružnice v úhlu 60°, kterou lze na mapovém podkladu manuálně natočit do zvoleného směru na směrové růžici dle směru proudění větru. Výstupy modelace softwarového nástroje TerEx lze rovněž exportovat do .xls souboru nebo uložit na server pro další použití a editaci. V rámci vytvořeného grafu jsou proti sobě zaneseny hodnoty koncentrace látky na ose y a vzdálenost od zdroje úniku na ose x. Výsledný graf zobrazuje vývoj koncentrace látky v prostoru v závislosti na vzdálenosti od zdroje úniku. V grafu je dále vyobrazena koncentrace IDLH dané látky [60, 101]. Požadované vstupní údaje modulem DEGAS pro tvorbu modelací dle různé charakteristiky jsou uvedeny v následujícím výčtu:

- havarijní model – výběr požadovaného havarijního modelu z nabídky;
- látka – výběr požadované látky z databáze;
- výška měření větru/teploty (m) – výběr výšky měření meteorologických podmínek, 3 nebo 10 m nad zemí;
- teplota vzduchu (°C);
- rychlost větru (m/s) – min. 1, max. 10 m/s;
- relativní vlhkost (%) – výběr relativní vlhkosti vzduchu, 5 % – velmi sucho, 25 % – jasno, slunečno, 50 % – oblačno, polojasno, 75 % – zataženo, 99 % – déšť, mlha;
- zataženo (%) – pokrytí oblohy mraky;
- doba vzniku – doba a roční období vzniku úniku, denní doba v létě, zímě, na podzim nebo na jaře, noční, večerní a ranní doba;
- povrch – typ okolní krajiny, obytná krajina, zemědělská krajina, průmyslová krajina, kultivovaná krajina, rovina;
- teplota látky (°C) – max. 1000 °C, při nevyplnění je použita teplota okolního vzduchu;
- typ rozptylu – volba charakteristiky zdroje úniku, odpar z kaluže, horizontální únik typu JET, vertikální únik typu JET, jednorázový únik;
- pro odpar z kaluže dále:
 - trvání úniku (s), plocha kaluže (m²) – min. 1, max. 500 m²;
- pro horizontální únik typu JET dále:

- trvání úniku (s), průměr únikového otvoru (m) – min. 0,001, max. 1 m, plocha únikového otvoru (m²), přetlak látky v zařízení (kPa) – min. 1, max. 30 000 kPa, výška otvoru nad zemí (m);
- pro vertikální únik typu JET dále:
 - trvání úniku (s), průměr únikového otvoru (m) – min. 0,001, max. 1 m, plocha únikového otvoru (m²), přetlak látky v zařízení (kPa) – min. 1, max. 30 000 kPa, výška výtrysku unikající látky (m);
- pro jednorázový únik dále:
 - hloubka zásobníku (m), šířka zásobníku (m) výška zásobníku (m), uniklé množství látky (kg) – min. 0, max. 100 000 kg [101].

5.1.3 Verifikace výsledků modelace modulu DEGAS a komparace s výsledky měření a observacemi druhého terénního experimentu

Pro verifikaci výsledků modelace s využitím modulu DEGAS byla vytvořena modelace úniku těžkého plynu ze zařízení, která svými vstupními hodnotami a parametry odpovídá reálným podmínkám, jež byly sledovány a zaznamenány při realizaci hlavní části experimentálního šetření a terénních měření projektu DEGAS. Jednalo se konkrétně o podmínky druhého experimentu, při kterém byl realizován únik těžkého plynu ze zásobníku. Výsledky modelace byly následně komparovány s modelací vytvořenou prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA za použití modelu Heavy Gas. Pro účely modelace byl pozměněn jediný údaj, kterým je výška únikového otvoru nad zemí z 1 m na 0 m. Důvodem byl fakt, že jsou oba použité modely modelačních softwarových nástrojů koncipovány primárně pro únik lokalizovaný při zemi a TerEx v daných podmínkách umožňuje provést modelaci pouze s nulovou výškou nad zemí. Vstupní parametry modelací byly pro oba nástroje totožné, nicméně se z podstaty vyžadovaných vstupních údajů mírně lišily objemem zadávaných dat, nikoliv jejich hodnotami. Na závěr byly výsledky modelací obou nástrojů komparovány s naměřenými a korigovanými daty a observacemi v průběhu experimentu. Prostřednictvím nástroje ALOHA byly vytvořeny dvě modelace, přičemž v první byl použit jako zdroj úniku zásobník a při druhé byl zvolen přímý zdroj s kontinuálním únikem. Vstupní údaje pro modelace za podmínek experimentálního šetření byly následující (A – údaj požadovaný pouze nástrojem ALOHA, T – údaj požadovaný pouze nástrojem TerEx):

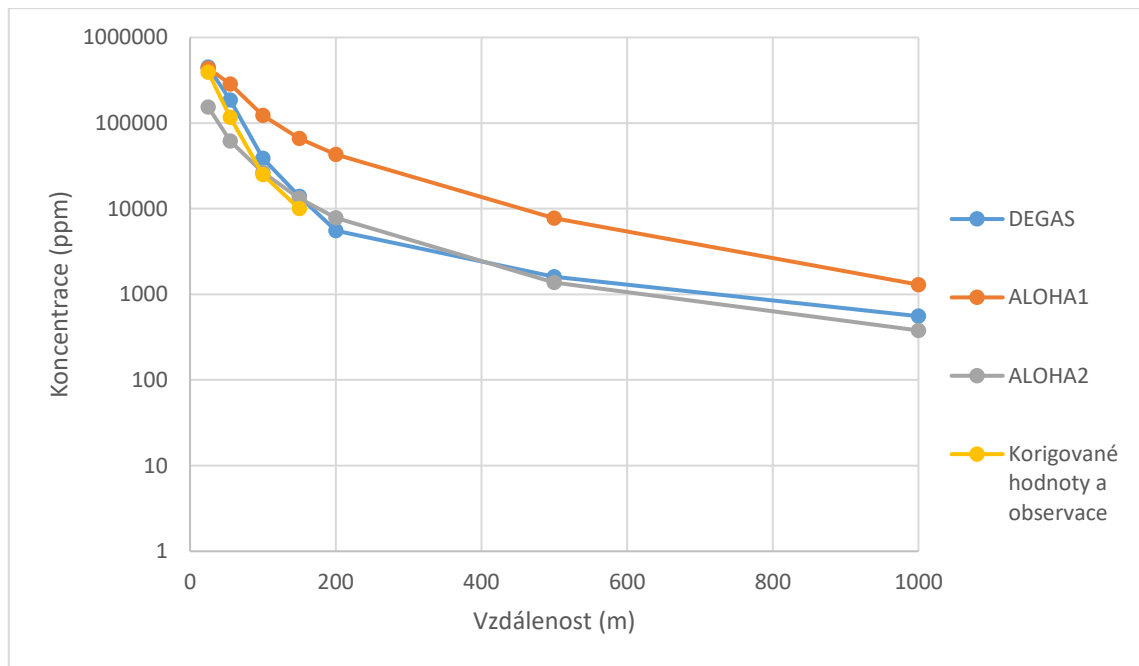
- lokalita – vojenské letiště v Bechyni (425 m n.m., A);
- havarijní model – DEGAS (T), Heavy Gas (A);
- látka – zkapalněný oxid uhličitý;
- výška měření povětrnostních podmínek – 3 m;
- teplota vzduchu – 8 °C;
- rychlost a směr větru – 1 m/s, ze severozápadu, NW (A);
- relativní vlhkost – 75 %;
- pokrytí oblohy mraky – 100 %;
- den vzniku události – den, jaro (T), 4. 10. 2017, 10:00 hod (A);
- charakter okolní krajiny – rovina (T), bez okolních budov, drsnost terénu 2,1 cm (A);
- třída stability atmosféry – D (A);
- typ rozptylu – horizontální únik typu JET (T);
- teplota látky – 8 °C;
- průměr únikového otvoru – 0,04 m (0,00126 m²) (T);
- typ únikového otvoru – potrubí (A);
- doba trvání úniku – 960 s;
- přetlak látky v zařízení – 1 800 kPa (T);
- výška únikového otvoru nad zemí – 1 m (pro účely modelace 0 m);
- rozměry zásobníku – cylindrický zásobník 1,800 x 4,134 m, objem 10 510 l (A);
- objem látky v zařízení – 6 000 kg (6,29 m³, 59,9 % kapacity zásobníku) (A);
- rychlost úniku – 375 kg/min (A).

V rámci komparace výsledků modelací obou softwarových nástrojů byla srovnávána koncentrace látky v určených vzdálenostech od zdroje úniku. Tyto vzdálenosti byly zvoleny na základě vybraných výše uvedených korigovaných koncentrací látky a obecných vzdáleností pro prezentaci výsledků modelace ve vzdáleném poli. Dále byly vybrány vzdálenosti, ve kterých byly umístěny detekční přístroje a vzdálenosti, ve kterých lze na základě observace experimentu reálně odhadnout přibližnou koncentraci látky. Konkrétně se jednalo o vzdálenosti 25, 55, 100, 150, 200, 500 a 1000 m. Dále byly na základě určených hodnotících koncentrací látky oběma nástroji komparovány vzdálenosti, do kterých byl vypočten dosah látky ve zvolené koncentraci. Přesněji se jednalo o koncentrace AEGL/PAC 2, 3 a hodnota IDLH. Výsledné hodnoty

jsou uvedeny v tabulce 9 a na obrázku 10. Kompletní výstupy modelací jsou uvedeny v příloze 2. Modelace vytvořené prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA byly označeny číselně, přičemž první modelace (ALOHA 1) prezentuje výsledky modelace úniku ze zásobníku a druhá modelace (ALOHA 2) prezentuje výsledky modelace z přímého zdroje s kontinuálním únikem.

Tabulka 9: Výsledky modelace podmínek experimentu dle modulu DEGAS a nástroje ALOHA

| Vzdálenost od zdroje | DEGAS | ALOHA 1 | ALOHA 2 |
|--|--|--|--|
| 25 m | 810 000 mg/m ³ , 450 000 ppm | 787 000 mg/m ³ , 437 000 ppm | 277 000 mg/m ³ , 154 000 ppm |
| 55 m | 335 000 mg/m ³ , 186 000 ppm | 482 000 mg/m ³ , 286 000 ppm | 111 000 mg/m ³ , 61 600 ppm |
| 100 m | 70 000 mg/m ³ , 38 900 ppm | 221 000 mg/m ³ , 123 000 ppm | 48 000 mg/m ³ , 26 500 ppm |
| 150 m | 25 000 mg/m ³ , 13 900 ppm | 120 000 mg/m ³ , 66 400 ppm | 24 000 mg/m ³ , 13 200 ppm |
| 200 m | 10 000 mg/m ³ , 5 560 ppm | 77 000 mg/m ³ , 43 000 ppm | 14 000 mg/m ³ , 7 840 ppm |
| 500 m | 2 900 mg/m ³ , 1 610 ppm | 14 000 mg/m ³ , 7 740 ppm | 2 500 mg/m ³ , 1 370 ppm |
| 1000 m | 1 000 mg/m ³ , 556 ppm | 2 300 mg/m ³ , 1 300 ppm | 680 mg/m ³ , 379 ppm |
| Koncentrace látky | DEGAS | ALOHA 1 | ALOHA 2 |
| 72 g/m ³ , 40 000 ppm (IDLH) | 90 m | 212 m | 76 m |
| 70 g/m ³ , 38 889 ppm | 100 m | 215 m | 80 m |
| 50 mg/m ³ , 28 ppm | 5 143 m | 3 900 m | 4 000 m |



Obrázek 10: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru dle podmínek experimentu

Při vyhodnocení výsledků modelací lze sledovat tři základní oblasti, ve kterých se modelace shodují či rozcházejí. Jedná se o oblast blízkého pole do 100 m, oblast střední vzdálenosti do 200 m, a oblast vzdáleného pole do 1 000 m. V bezprostřední blízkosti zdroje úniku dosahují nejlepších výsledků modelace DEGAS a ALOHA 1, které uvádějí vzdáleně podobné hodnoty k odhadované koncentraci látky při experimentálním úniku v blízkém poli, viz tabulka 8. Tyto výsledky se ale ve vzdálenosti 55 i 100 m začínají výrazně rozcházet a modelace ALOHA 1 v těchto oblastech uvádí výrazně vyšší hodnoty oproti výsledku modulu DEGAS i odhadu koncentrace látky při experimentu. Maximální vypočtená koncentrace modulem DEGAS je 458 000 ppm ve vzdálenosti 29 m od zdroje úniku. Realistický odhad koncentrace je v blízkosti zdroje úniku ještě vyšší. Výsledek modelace ALOHA 2 v této oblasti ukazuje výrazně nižší koncentraci látky oproti výsledkům ostatních modelací i odhadované koncentraci látky. Výsledky této modelace ovšem oproti ostatním uvádějí nejpodobnější hodnotu k odhadované koncentraci látky ve vzdálenosti 100 m od zdroje úniku.

Ve střední vzdálenosti i v oblasti vzdáleného pole vykazují modelace DEGAS a ALOHA 2 podobné výsledky. Na základě observace experimentu lze dedukovat, že ve vzdálenosti přibližně 150 m byla koncentrace látky vyšší než 10 000 ppm, jelikož do této vzdálenosti byl v iniciální fázi experimentu pozorovatelný hustý oblak těžkého plynu tvořený směsí plynu a aerosolu. Obě uvedené modelace v této oblasti shodně

uvádějí hodnotu vyšší než 13 000 ppm, což se shoduje s observací při experimentu. Pro oblast vzdáleného pole lze již komparovat pouze rozdílnost výsledků modelací, jelikož v této oblasti nebyly při experimentu umístěny detekční přístroje. Oproti ostatním dvou modelacím udává v této oblasti modelace ALOHA 1 výrazně vyšší koncentrace, které lze označit za nadhodnocené. Dle výsledků ALOHA 1 by byl vytvořený oblak těžkého plynu pozorovatelný až do vzdálenosti přibližně 445 m, což se neshoduje s reálnými podmínkami. U modelace ALOHA 1 je ale nezbytné uvažovat její chybovost na základě vypočtené doby a rychlosti úniku. Tyto hodnoty byly vypočteny na dobu trvání 4 minuty s rychlostí úniku 1 950 kg/min. Reálná doba úniku ovšem byla 19 minut s rychlostí úniku 375 kg/min. Modul DEGAS vypočetl rychlost úniku rovněž chybně na 248 kg/min, což je ale podobnější hodnota reálným podmínkám oproti druhé modelaci. Na základě těchto rozdílů lze vysvětlit i celkovou rozdílnost výsledků modelace ALOHA 1 oproti výsledkům ostatních dvou modelací. Pro modelaci ALOHA 2 byly zadány reálné hodnoty úniku a ve střední oblasti i ve vzdáleném poli vykazuje akceptovatelné výsledky. Jako směrodatné lze tedy v uvedené oblasti brát výsledky modelací DEGAS a ALOHA 2. V rámci modulu DEGAS se zde uplatňuje i nastavený disperzní koeficient, který zpřesňuje modelaci právě ve vzdáleném poli a je závislý na vzdálenosti od zdroje úniku. Modelace ALOHA 2 selhává při výpočtu koncentrace látky v blízkém poli a zejména v blízkosti zdroje úniku, kde udává výrazně nižší koncentraci látky, než jaká se v reálných podmínkách vyskytovala. V oblasti vzdáleného pole udává tato modelace výraznější pokles koncentrace látky v prostoru než modul DEGAS.

Samotné výsledky modelací experimentu prostřednictvím obou softwarových nástrojů a použitých druhů výpočtů se v oblasti blízkého pole, střední vzdálenosti i vzdáleného pole liší ve vypočtené koncentraci o více jak 10 %. Toto platí pro všechny vzdálenosti kromě 150 m, kde jsou výsledky modulu DEGAS a modelace ALOHA 2 rozdílné o méně jak 10 %. Výsledky všech modelací jsou taktéž rozdílné o více jak 10 % ve vypočteném dosahu stanovených koncentrací látky a lze konstatovat jejich významnou rozdílnost, byť jsou výsledky DEGAS a ALOHA 2 ve střední vzdálenosti a ve vzdáleném poli zdánlivě podobné. Ve vypočtené vzdálenosti se shodují pouze výsledky obou modelací ALOHA pro koncentraci 28 ppm. Při bližší komparaci vypočtených hodnot dle jednotlivých modelací s korigovanými hodnotami lze sledovat, že se ve vzdálenostech 25, 55 a 100 m výsledky relativně shodují s modelací prostřednictvím modulu DEGAS. Výsledky

modulu DEGAS lze v jednotlivých oblastech shledat konzistentními a v uvedených vzdálenostech udávají relativně podobné hodnoty uvedenému odhadu. Výsledky modelace ALOHA 1 se z jednotlivých modelací korigovaným hodnotám nejvíce přibližují v blízkosti zdroje úniku ve vzdálenosti 25 m, ale poté udávají výrazně nižší úroveň poklesu koncentrace látky v prostoru. Výsledky modelace ALOHA 2 naopak udávají výrazně nižší koncentraci látky v blízkosti zdroje úniku, ale ve vzdálenosti 100 m se korigovaným hodnotám oproti ostatním nejvíce přibližují. Z tohoto důvodu lze výsledky obou modelací softwarového nástroje ALOHA shledat v tomto případě nekonzistentní pro oblast blízkého pole a střední vzdálenosti.

Na základě prezentovaných výsledků lze konstatovat, že nejrealističtějších výsledků dosahuje ze tří provedených modelací výsledek vytvořený modulem DEGAS. Tyto výsledky jsou rovněž v relativní shodě i při komparaci s odhadem koncentrace CO₂ při experimentálním úniku v blízkém poli, viz tabulka 8 a obrázek 10, a při komparaci s provedenými observacemi v průběhu experimentu. Při modelaci úniku a šíření těžkého plynu v atmosféře je nezbytné vzít v potaz, že ani jeden nástroj do modelací zcela nezanáší dynamiku úniky látky, která je proměnná a s postupem času se únik zmenšuje. Při interpretaci výsledků modelací je žádoucí, aby modelace prezentovaly maximální dosah nebezpečné koncentrace látky v prostředí, ke kterému dochází při úniku typu JET v iniciální fázi. Toto je podstatné zejména u látek, které jsou za standardních podmínek těžší vzduchu, jelikož mohou být v prostředí perzistentní a je nezbytné vědět, v jaké oblasti může být nezbytné realizovat úkony chemického průzkumu, ochrany obyvatelstva a další opatření.

5.2 Výsledky modelace úniku a šíření těžkých plynů v podmínkách vybraných chemických havárií

Softwarové modelace potenciačních dopadů chemických havárií se v dnešní době standardně využívají při tvorbě bezpečnostní dokumentace v chemickém průmyslu a slouží také jako vhodný nástroj pro doplnění analýz rizik. V určité a omezené míře jsou využitelné i jako podpůrný nástroj vizualizace dopadů chemických havárií při jejich řešení. Jednotlivě lze modelovat všechny základní havarijní projevy chemických havárií, avšak modelace a jejich současné pojetí vykazují řadu omezení. V obecné míře používají softwarové nástroje a různé matematické modely zjednodušené vnímání a popis jednotlivých havarijních projevů chemických havárií a panuje zde kompromis mezi náročností a požadavky na hardwarové prvky, vstupní data pro tvorbu modelací a celkovou mírou využitelnosti výsledků v praxi. Dalším důležitým omezením je nemožnost předvídání a modelace v rámci tzv. domino efektu, který je často popisován a může se vyskytovat v průběhu chemických havárií. I přes celou řadu nedostatků, kterým je blíže věnována pozornost v teoretické části práce, jsou modelace dopadů chemických havárií využívaným prvkem v chemické bezpečnosti. Je ale nezbytné si uvědomit, že modelace ze své podstaty nejsou a ani nemohou být zcela přesné a výsledky je nezbytné brát orientačně. Nicméně je vhodné, aby jejich uživatelé měli základní přehled o způsobu tvorby a využití modelací i jejich orientační míře validity.

K demonstraci validity výstupů modelací a jejich výsledků či predikci dopadů chemických havárií jsou níže uvedeny tři dle stanovené metodiky vybrané chemické havárie, jejichž dopady byly modelovány prostřednictvím modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx a modelu Heavy Gas nástroje ALOHA. Vzhledem k výsledkům komparativní modelace obou nástrojů vytvořené v rámci vyhodnocení projektu DEGAS a jejich validity v reálných podmínkách, byl pro následující modelace v nástroji ALOHA zvolen pouze způsob modelace se stanovenou rychlostí úniku. Modelace dle určení velikosti zásobníku, na základě které softwarový nástroj dopočítá rychlost úniku, nebyla použita z důvodu vysoké chybovosti v určení rychlosti úniku a z ní plynoucí nespolehlivosti predikce šíření látky v atmosféře ve střední vzdálenosti a ve vzdáleném poli. Tento postup taktéž není univerzálně vhodný, kdy pro jeho využití je nezbytné modelovat únik přímo ze skladovacího zařízení. Jednotlivé havárie a jejich modelace byly zaměřeny výhradně na modelaci šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře. Výsledky

modelací byly následně komparovány navzájem a rovněž s reálnými dopady uvedených havárií.

5.2.1 Vybrané chemické havárie

První zvolenou chemickou havárií k modelaci byla událost, která se odehrála v USA ve městě Festus dne 14. 8. 2002 v dopoledních hodinách. Při této havárii došlo k úniku chloru ze železniční cisterny, při kterém uniklo necelých 22 tun látky, přesněji 21 772 kg (48 000 liber). Samotný únik trval bezmála tři hodiny, než se jej podařilo zastavit. K úniku došlo kvůli technické závadě na odstavené cisterně v areálu podniku DPC Enterprises, L.P. Příčinou úniku látky byla ruptura hadice, pomocí které byl chlor přečerpáván z cisterny do zařízení. Železniční cisterna byla vybavena bezpečnostním průtokovým ventilem, který se automaticky uzavře při průtoku převyšujícím 6 800 kg (15 000 liber) látky za hodinu. Vzhledem k celkovému uniklému množství látky byla rychlost úniku na této hranici a k uzavření ventilu nedošlo. V chemickém závodě byla ale bezpečnostní vybavenost a počet detekčních čidel na dobré úrovni a při detekci látky v ovzduší došlo k uzavření ventilů v přečerpávacím a plnicím zařízení. Z tohoto důvodu došlo k úniku látky pouze ze železniční cisterny. Přesný objem uniklé látky je znám, jelikož její iniciální objem v cisterně byl přibližně 81,6 tun (180 000 liber) a dle automatických záznamů z přečerpávacího a plnicího zařízení bylo v momentě ruptury hadice převedeno 36,3 tun (80 000 liber) látky. Po havárii byla cisterna zvážena a hodnota porovnána s iniciální hmotností naplněného vagónu, čímž byl stanoven celkový objem uniklé látky při havárii. V době havárie cisterna obsahovala 45 360 kg chloru (100 000 liber; 31,7 m³, 48,4 % kapacity zásobníku). Při nehodě bylo evakuováno blízké okolí a došlo k zasažení a následné hospitalizaci 66 osob. V důsledku směru větru byla většina vytvořeného oblaku chloru zanesena mimo obytné oblasti, nicméně obyvatelům bylo doporučeno se ukryt, nevětrat a nevycházet ven. Většina intoxikovaných osob byla z blízkého kempu (Traylor park), který se od místa havárie nachází přibližně 200 m vzdušnou čarou a je od chemického podniku dělen pouze úzkým pruhem vegetace [102].

Druhou zvolenou havárií je událost, která se odehrála v noci dne 6. 1. 2005 ve městě Graniteville v USA. Při této havárii došlo k železniční nehodě nákladního vlaku, který mimo dalšího nákladu převážel tři cisternové vozy s chlorem. Z chemických látek byl transportován i hydroxid sodný a kresol. Celkem obsahovalo nebezpečné látky nebo

jejich rezidua 14 vagónů. K události došlo v důsledku chyby a nedbalosti drážního technika, který večer předchozího dne zapomněl vrátit manuálně ovládanou výhybku umožňující průjezd městem do původního stavu. Neúmyslně tak odklonil projíždějící nákladní vlak na vedlejší technickou kolej, na které byl odstaven druhý vlak bez obsluhy. Následkem srážky došlo k vykolejení lokomotiv obou vlaků a 16 ze 42 vagónů projíždějící soupravy. Mezi vykolejenými vagóny byly i zmiňované tři cisternové vozy s chlorem z nichž u jedné došlo k poškození pláště a úniku látky do okolí. Objem látky v cisterně byl necelých 90 tun (81 647 kg, 180 000 liber; 57 m³, 87 % kapacity zásobníku) a přibližně 60 tun látky při havárii uniklo. Typ havarované cisterny byl totožný s předchozí uvedenou havárií (DOT 105J500W). Ve městě a přilehlých obcích žilo v roce 2005 přibližně 22 000 obyvatel. Havárie měla za následek 9 obětí, 554 zasažených osob a 5 400 osob z blízkého okolí bylo evakuováno [103]. Vyobrazení dopadů havárií ve městě Festus a Graniteville je uvedeno v příloze 3.

Třetí zvolenou havárií je událost, která se odehrála dne 3. 2. 2004 ve Francii, konkrétně v chemických závodech ve městě Tavaux, které se zaměřují na výrobu PVC a obdobných polymerů. K havárii došlo v brzkých ranních hodinách na zařízení pro výrobu těchto látek, které bylo jen minimálně automatizováno. Z tohoto důvodu zde vznikl prostor pro chybu lidského faktoru. V průběhu výroby neuzavřel operátor všechny příslušné ventily a z autoklávu o objemu 27 m³, v němž výroba probíhala, došlo k více než třímínutovému úniku vinylchloridu o celkovém objemu 1585 kg do atmosféry prostřednictvím 14 m vysokého komínu. V této době se spustil poplach na bezpečnostním detekčním zařízení v podniku při překročení koncentrace látky 10 ppm v ovzduší, čímž operátor zjistil svou chybu a únik bez prodlení eliminoval. Jelikož došlo k úniku značného objemu vysoce vznětlivé a těkavé látky, udávaná hodnota LEL je 38 000 ppm [52], hrozilo její vznícení od okolních tepelných zdrojů. Ke vznícení látky nedošlo, ale pouze k toxickému úniku, při kterém došlo i vzhledem k fyzikálně chemickým vlastnostem látky k její rychlé disperzi v prostředí. Průběh úniku byl zaznamenán pomocí sítě interních detekčních zařízení v podniku, které odečítaly koncentraci látky každé 2 minuty. Ve vyšetřovací zprávě této havárie je rovněž uveden soudobý výsledek modelace daného úniku pomocí softwarového modelačního nástroje PHAST. Maximální zaznamenaná koncentrace látky ve výrobní hale byla 2 753 ppm po dobu kratší než 20 minut a koncentrace látky ve vedlejší hale byla 22 ppm po dobu kratší než 20 minut. Při havárii nedošlo ke ztrátám na životech ani poranění osob, byť došlo k detekovanému překročení

nebezpečné koncentrace látky dle hodnoty AEGL 2 pro 30minutovou expoziční dobu. Reálná koncentrace látky u zdroje úniku byla ovšem podstatně vyšší. Zasažená část podniku byla na dobu několika hodin evakuována [104].

5.2.2 Vstupní data pro modelace, jejich vyhodnocení a komparace výsledků

Modelace chemické havárie ve městě Festus

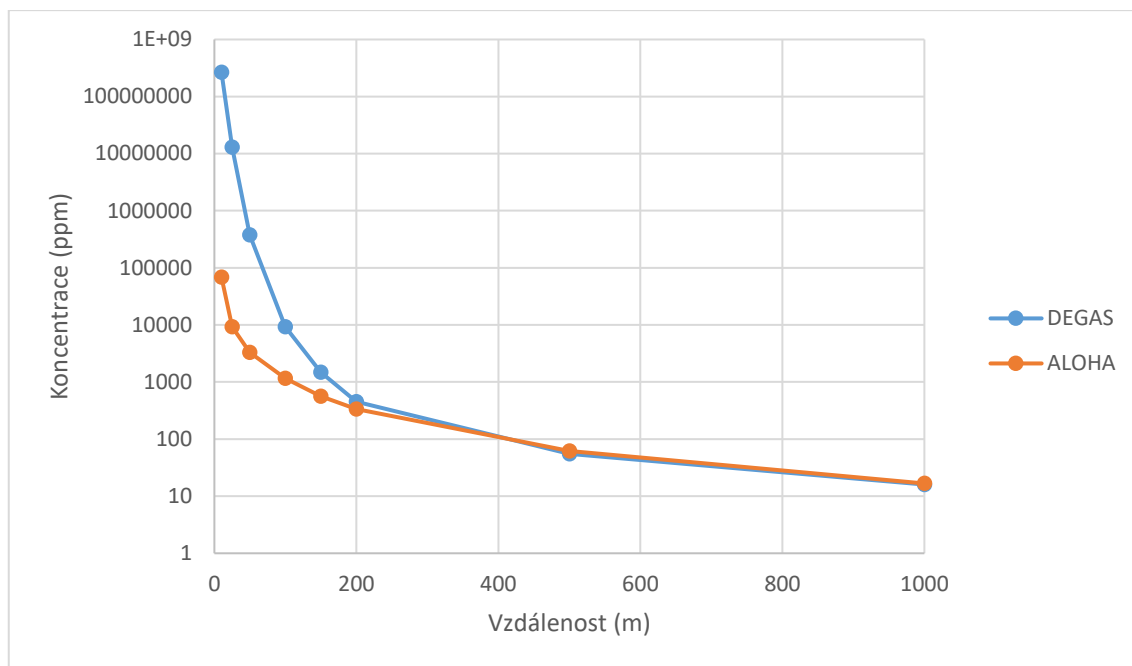
Pro účely modelace, která trvala takřka 3 hodiny, bylo nezbytné s přihlédnutím k omezení nástroje ALOHA, který modeluje pouze po dobu 60 minut, modelační dobu omezit na tuto hodnotu. Čas modelace byl určen na 9:30 hod a jedná se o dobu, ve které byla havárie v plném rozsahu. V této době se rovněž evakovali zaměstnanci podniku. Dispozice přesných meteorologických podmínek z místa události je omezená, a tudíž byly zvoleny hodnoty z nejbližší dostupné měřicí stanice, Lambert–St. Louis International Airport, která je vzdálená 63 km vzdušnou čarou od místa události. Uvedené meteorologické podmínky odpovídají průměrným měřeným hodnotám v průběhu celé doby havárie. Odečtené hodnoty jsou v dostatečné shodě s meteorologickými podmínkami uvedenými ve vyšetřovací zprávě havárie, které jsou ale neúplné pro tvorbu modelací. Uvedenou událost lze charakterizovat jako provozní havárii. Vstupní data pro tvorbu jednotlivých modelací jsou uvedena níže:

- lokalita – DPC Enterprises, L.P. (128 m n.m., A);
- den a čas vzniku události – den, léto (T), 14. 8. 2002, 9:30 hod (A);
- havarijní model – DEGAS (T), Heavy Gas (A);
- látka – zkapalněný chlor (CAS 7782-50-5), stlačený plyn;
- výška měření povětrnostních podmínek – 10 m;
- teplota vzduchu – 21 °C;
- rychlost a směr větru – 8,25 m/s, ze severozápadu, NW (A);
- relativní vlhkost – 91 %;
- pokrytí oblohy mraky – 100 %;
- charakter okolní krajiny – lesnatá/zemědělská krajina, jednopodlažní budovy kryté vegetací;
- třída stability atmosféry – D (A);
- typ rozptylu – horizontální únik typu JET (T);
- teplota látky – 21 °C;

- průměr únikového otvoru – 0,0254 m (1 inch; 0,0005 m²) (T);
- typ únikového otvoru – prasklé potrubí (A);
- doba trvání úniku – 3600 s;
- přetlak látky v zařízení – 1 207 kPa (175 psig) (T);
- výška únikového otvoru nad zemí – 3,5 m (pro účely modelace 0 m);
- objem uniklé látky – 21 772 kg;
- rychlost úniku – 2,016 kg/s (A) [102, 105, 106, 107].

Tabulka 10: Výsledky modelace havárie ve městě Festus

| Vzdálenost od zdroje | DEGAS | ALOHA |
|--|--|---|
| 10 m | 769 000 000 mg/m ³ , 265 000 000 ppm | 198 500 mg/m ³ , 68 500 ppm |
| 25 m | 37 700 000 mg/m ³ , 13 000 000 ppm | 26 960 mg/m ³ , 9 300 ppm |
| 50 m | 1 100 000 mg/m ³ , 379 500 ppm | 9 620 mg/m ³ , 3 320 ppm |
| 100 m | 27 000 mg/m ³ , 9 315 ppm | 3 260 mg/m ³ , 1 160 ppm |
| 150 m | 4 300 mg/m ³ , 1 480 ppm | 1 630 mg/m ³ , 561 ppm |
| 200 m | 1 300 mg/m ³ , 449 ppm | 974 mg/m ³ , 336 ppm |
| 500 m | 160 mg/m ³ , 55 ppm | 179 mg/m ³ , 61,7 ppm |
| 1000 m | 47 mg/m ³ , 16 ppm | 48 mg/m ³ , 16,7 ppm |
| Koncentrace látky | DEGAS | ALOHA |
| 29 mg/m ³ , 10 ppm (IDLH) | 1,3 km | 1,3 km |
| 14,5 mg/m ³ , 5 ppm | 1,94 km | 1,9 km |
| 58 mg/m ³ , 20 ppm (AEGL 3) | 900 m | 909 m |
| 5,8 mg/m ³ , 2 ppm (AEGL 2) | Více než 2,5 km | 3,1 km |



Obrázek 11: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Festus

Výsledky modelace chemické havárie ve městě Festus uvedené v tabulce 10 a na obrázku 11 vypočtené softwarovými nástroji TerEx a ALOHA dle stanovené metodiky ukazují predikovaný vývoj koncentrace látky v prostoru a v druhé části tabulky uvádějí vypočtenou vzdálenost dle konkrétních koncentrací. Z výsledků je patrný zásadní rozdíl ve vypočtené koncentraci v blízkém poli, ale ve střední vzdálenosti a vzdáleném poli se výsledky vzájemně přibližují. Uvedené koncentrace byly oběma nástroji vypočteny do prakticky shodných vzdáleností. Tento závěr se shoduje i se závěrem modelací realizovaných v rámci projektu DEGAS, kde byl rovněž patrný rozdíl ve výpočtech v blízkém poli a následná relativní shoda ve střední vzdálenosti a ve vzdáleném poli. V rámci modelace této události jsou výsledky oproti modelaci simulované události v projektu DEGAS vzájemně více ve shodě. Nedostatek ve výsledcích je patrný u nástroje TerEx při uvedení vzdálenosti koncentrace 2 ppm, jelikož výsledný generovaný graf pro tuto modelaci je limitován na 2,5 km. Lze ale předpokládat, že výsledná vzdálenost by v dané koncentraci byla podobná výsledku nástroje ALOHA. Pozornost lze blíže věnovat koncentraci v blízkém poli vypočtené modulem DEGAS, která uvádí koncentraci převyšující 1 000 000 ppm, což znamená, že koncentrace plynu ve vzduchu bude 100 %. Uvedené ovšem značí, že v nástroji TerEx není nastavena maximální hodnota pro tuto škálu. Z modelace je tedy patrné nejen, že v prostředí bude prakticky absolutní koncentrace látky, ale také, že hustota látky ve vzduchu bude velmi vysoká.

Modul DEGAS udává pro tuto havárii v blízkém poli výsledky, které jsou srovnatelné s pozorováním při havárii. ALOHA udává v blízkém poli koncentrace, které jsou značně podhodnoceny. Samotné výsledky obou modelací jsou v oblasti blízkého pole a střední vzdálenosti rozdílné o více jak 10 %. V oblasti vzdáleného pole jsou výsledky modelací ve vzdálenosti 500 m podobné, ale až ve vzdálenosti 1 000 m jsou rozdílné o méně jak 10 % a lze tedy v této oblasti konstatovat jejich relativní shodu. Při výpočtu vzdálenosti dosahu stanovených koncentrací jsou výsledky rozdílné o méně jak 10 % a lze konstatovat jejich shodu. Výstupy modelací obou softwarových nástrojů, včetně grafického zanesení úniků na mapový podklad, jsou uvedeny v příloze 4.

Při komparaci výsledků modelace s reálnými podmínkami havárie lze využít zejména videozáznam havárie pořízený z vrtulníku televizním štábem, který zabírá blízkou oblast zdroje úniku a lze sledovat hustý oblak těžkého plynu o vysoké koncentraci [108]. Viditelná vzdálenost vytvořeného oblaku chloru je přibližně 85 m v nejvzdálenějším bodě. V této vzdálenosti se nacházel plot areálu a mírné vyvýšení přilehlé komunikace, které vytvářely terénní překážku pro šíření oblaku těžkého plynu. V této vzdálenosti musela dle předchozích poznatků být koncentrace plynu vyšší než 10 000 ppm. DEGAS počítá tuto koncentraci do vzdálenosti necelých 100 m, což lze považovat za odpovídající reálným podmínkám, pokud by ve zmiňované vzdálenosti nebyla přítomna terénní překážka, která omezila valení oblaku těžkého plynu. Uvedené ale neznamená, že se látka nešířila dál v nižších koncentracích pomocí proudění větru. Z jedné strany byl prostor omezen samotným chemickým závodem a z druhé strany železničním náspem. Tyto terénní překážky vytvořily omezenou oblast, ve které se vytvořilo „jezero“ oblaku těžkého plynu o velmi vysoké koncentraci. Výsledek modelace dle modulu DEGAS na základě zadaných vstupních parametrů uvádí nižší rychlost úniku, než jaká byla v reálných podmínkách, konkrétně necelých 1,5 kg/s. Reálná rychlost úniku ale byla přibližně 2 kg/s.

Ve vyšetřovací zprávě havárie [102] je uvedeno, že se unikající plyn mohl v době krátkého bezvětří šířit západním směrem do oblasti blízkého kempu. Dále je zde uvedeno, že se oblak těžkého plynu šířil přes přilehlou komunikaci do vedlejšího stavebního podniku, kde jej zpozorovali zaměstnanci, což lze potvrdit, jelikož je chlor viditelný i v nižších koncentracích jako žlutozelený plyn. Zmiňovaný podnik se nachází ve vzdálenosti 150 m od místa havárie a obě modelace udávají v této vzdálenosti

koncentraci vysoce převyšující hodnotu IDLH, tudíž zde hrozily závažné zdravotní následky osob při expozici unikající látky. Zaměstnanci podniku se evakovali a následně byli podrobena lékařskému vyšetření. Při 10minutové expoziční době je hodnota IDLH chloru udávána na 50 ppm [109]. Tuto hranici vysoce převyšují výsledky obou modelací. Pro účely vyšetřovací zprávy byla vytvořena soudobá modelace šíření chloru v prostředí, které udává, že dosah koncentrace 3 ppm mohl být až do vzdálenosti 6 km, což výsledky zde vytvořených modelací nepotvrzují [102]. Použitý softwarový nástroj a matematický model pro tuto modelaci není bohužel ve zprávě uveden. Na základě komparace výsledků modelací s dopady reálné chemické havárie lze konstatovat, že vypočtené maximální dosahy nebezpečných koncentrací látky oběma nástroji se jeví jako realistické. Při výpočtu koncentrace látky v jednotlivých sledovaných oblastech dosahuje kvalitnějších výsledků modul DEGAS, byť uvádí mírnou nuanci v rychlosti úniku látky. Avšak v oblasti blízkého pole selhávají obě modelace, neboť modul DEGAS uvádí více než absolutní koncentraci látky v prostoru a ALOHA naopak koncentraci silně podhodnocenou. Z pohledu aplikace výsledků modelací v praxi je ale podstatný věrohodný odhad dosahu nebezpečné koncentrace látky v prostoru. V rámci této modelace se rovněž zásadně projevují nedostatky a omezení matematických modelů v popisu meteorologických a terénních podmínek, kdy modelace nejsou schopny únik přesně zanást do místních podmínek. I přes tyto nedostatky se pro popisovanou havárii jeví výsledky modelací obou softwarových nástrojů v oblastech nebezpečných koncentrací jako uspokojivé.

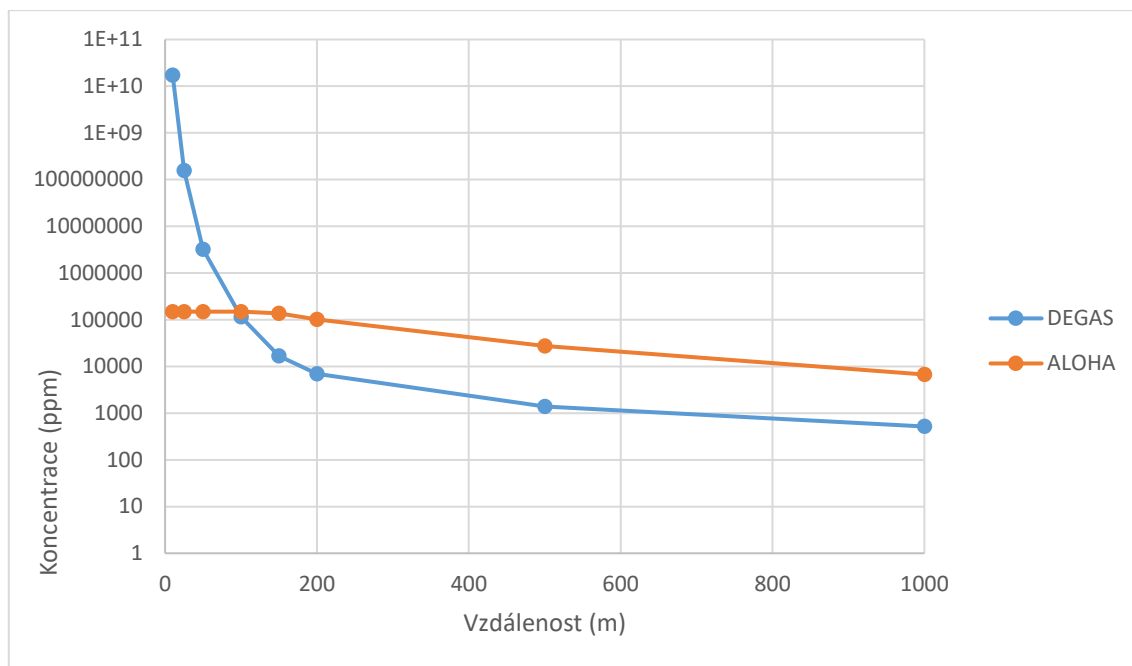
Modelace chemické havárie ve městě Graniteville

Pro účely modelace uvedené události byly meteorologické podmínky získány z nejbližší dostupné měřicí stanice, Augusta Regional Airport, která je lokalizována necelých 26 km vzdušnou čarou od místa havárie. Odečtené hodnoty jsou v dostatečné shodě s meteorologickými podmínkami uvedenými ve vyšetřovací zprávě havárie. Při havárii byl rovněž popisován Auto-Refrigeration efekt, který po iniciální fázi výrazně zpomalil rychlost úniku látky z poškozené cisterny a z tohoto důvodu došlo k úniku pouze odhadovaných 2/3 celkového objemu. V cisterně tedy zůstalo přibližně 27 200 kg látky. Uvedenou událost lze charakterizovat jako nejhorší možnou havárii. Vstupní data pro tvorbu jednotlivých modelací jsou uvedena níže:

- lokalita – Graniteville S.C. (67 m n.m., A);
- den a čas vzniku události – noc, zima (T), 6. 1. 2005, 2:39 hod (A);
- havarijní model – DEGAS (T), Heavy Gas (A);
- látka – zkapalněný chlor (CAS 7782-50-5), stlačený plyn;
- výška měření povětrnostních podmínek – 10 m;
- teplota vzduchu – 13 °C;
- rychlost a směr větru – 3,13 m/s, z jihozápadu, SSW (A);
- relativní vlhkost – 94 %;
- pokrytí oblohy mraky – 0 %;
- charakter okolní krajiny – obytná/lesnatá krajina, jednopodlažní budovy kryté vegetací;
- třída stability atmosféry – E (A);
- typ rozptylu – horizontální únik typu JET (T);
- teplota látky – 13 °C;
- průměr únikového otvoru – 0,863 x 0,127 m (34 x 5 inch; 0,1096 m²) (T);
- typ únikového otvoru – otvor (A);
- doba trvání úniku – 34 s;
- přetlak látky v zařízení – 621 kPa (90 psig) (T);
- výška únikového otvoru nad zemí – 1 m (pro účely modelace 0 m);
- objem uniklé látky – 54 480 kg;
- rychlost úniku – 1602 kg/s (A) [103, 106, 107, 110].

Tabulka 11: Výsledky modelace havárie ve městě Graniteville

| Vzdálenost od zdroje | DEGAS | ALOHA |
|--|--|--|
| 10 m | 49 880 000 000 mg/m ³ , 17 210 000 000 ppm | 431 900 mg/m ³ , 149 000 ppm |
| 25 m | 455 000 000 mg/m ³ , 157 000 000 ppm | 431 900 mg/m ³ , 149 000 ppm |
| 50 m | 9 400 000 mg/m ³ , 3 240 000 ppm | 431 900 mg/m ³ , 149 000 ppm |
| 100 m | 335 000 mg/m ³ , 115 600 ppm | 431 900 mg/m ³ , 149 000 ppm |
| 150 m | 49 000 mg/m ³ , 16 900 ppm | 400 000 mg/m ³ , 138 000 ppm |
| 200 m | 20 000 mg/m ³ , 6 900 ppm | 296 000 mg/m ³ , 102 000 ppm |
| 500 m | 4 000 mg/m ³ , 1 380 ppm | 79 130 mg/m ³ , 27 300 ppm |
| 1000 m | 1500 mg/m ³ , 518 ppm | 19 480 mg/m ³ , 6 720 ppm |
| Koncentrace látky | DEGAS | ALOHA |
| 29 mg/m ³ , 10 ppm (IDLH) | 11,4 km | Více než 10 km |
| 14,5 mg/m ³ , 5 ppm | 16,6 km | Více než 10 km |
| 58 mg/m ³ , 20 ppm (AEGL 3) | 8 km | 9,7 km |
| 5,8 mg/m ³ , 2 ppm (AEGL 2) | 2,8 km | Více než 10 km |



Obrázek 12: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Graniteville

Z výsledků modelace havárie ve městě Graniteville uvedených v tabulce 11 a na obrázku 12 lze při komparaci výstupů obou softwarových nástrojů konstatovat zásadní rozdíl ve všech sledovaných zónách kontaminace i ve vypočtených vzdálenostech dle určených koncentrací. Modelace ALOHA rovněž predikuje výrazně nižší úroveň poklesu koncentrace látky v prostoru než modul DEGAS. V bezprostřední blízkosti zdroje úniku a v blízkém poli udává modul DEGAS extrémně vysokou koncentraci látky v prostředí. Následně však uvádí výrazný pokles koncentrace látky v prostoru. ALOHA na druhou stranu udává v této oblasti koncentrace výrazně nižší, stejně jako u modelace předchozí havárie. Uvedené hodnoty vypočtené nástrojem ALOHA jsou navíc ve všech vzdálenostech blízkého pole totožné a k poklesu koncentrace dochází až ve střední vzdálenosti. Ve výpočtu vzdálenosti konkrétních koncentrací se zde navíc projevuje omezení nástroje ALOHA, který uvádí výsledky maximálně do vzdálenosti 10 km a minimální dobu trvání úniku 1 minuta. Z důvodu minimálního časového omezení lze alternativně změnit rychlost úniku v modelaci ALOHA na hodnotu 908 kg/s, kterou lze dosáhnout přepočtem trvání úniku na 60 vteřin při zachování celkového objemu uniklé látky. V tomto případě ale ve výsledcích nedojde k valnému rozdílu oproti výše uvedeným dosahům vypočtených vzdáleností dle určených koncentrací. Dosah koncentrace AEGL 3 byl v tomto případě vypočten do vzdálenosti 7,7 km a ostatní koncentrace jsou mimo limitní rozsah. Tento výsledek se v rámci nastavené meze významnosti 10 % shoduje s výsledkem výpočtu modulu DEGAS, který uvádí tuto

koncentraci do vzdálenosti 8 km. Uvedená úprava modelace se ale neshoduje s reálnými podmínkami havárie. Při výpočtu koncentrace látky v určených vzdálenostech od zdroje úniku udává alternativní modelace rozdílné koncentrace, které jsou v oblasti střední vzdálenosti a vzdáleného pole výrazně nižší oproti výše uvedeným. Výsledek alternativní modelace ALOHA udává ve vzdálenosti 150 m koncentraci 113 000 ppm, 200 m 77 000 ppm, 500 m 19 100 ppm a 1 000 m 4 150 ppm. Oproti výsledkům modulu DEGAS jsou tyto koncentrace stále velmi výrazně nadhodnoceny. Na základě uvedených výsledků lze konstatovat, že se veškeré vypočtené hodnoty modelací liší o více jak 10 %. Výstupy modelací obou softwarových nástrojů, včetně grafického zanesení úniků na mapový podklad, jsou uvedeny v příloze 5.

Dle vyšetřovací zprávy havárie [103] se při úniku látky vytvořil oblak chloru v okolí cisterny a zaplnil místo havárie, které bylo položeno přibližně o 1 metr níže oproti souběžné komunikaci a kolejišti. Jedná se tedy o limitovaný prostor terénními překážkami, který nelze do modelací řádně zanést. Dle modelace DEGAS by byl vytvořen hustý oblak unikající látky o koncentraci vyšší než 10 000 ppm až do vzdálenosti přibližně 180 m a dle modelace ALOHA do 860 m, respektive 696 m při alternativním postupu. Samotný prostor byl však omezen v nejvzdálenějších bodech od havárie ve vzdálenosti přibližně 70 m. Lze ale předpokládat, že se plyn o vysoké koncentraci eventuálně šířil i za tuto uvedenou vzdálenost. Dle observací záchranných složek a lokalizace obětí havárie byl dosah vysoce nebezpečné koncentrace látky přibližně 760 m severně, 305 m západně i východně a 275 m jižně. Ve zprávě bohužel není uvedena přesná hodnota deklarované koncentrace látky. Pokud bychom opět uvažovali koncentraci 50 ppm, tak by dle modelace DEGAS dosahovala do vzdálenosti přibližně 4 km a dle modelace ALOHA do vzdálenosti 6,9 km, respektive 5,4 km při alternativním postupu. Modelace ovšem v důsledku omezení výpočtů a matematických modelů nepočítají s výrazným šířením látky do jiných směrů, než jakým je nastaveno proudění větru. Pro vzdálenost 760 m po směru proudění větru udává modul DEGAS koncentraci látky 759 ppm a ALOHA 11 900 ppm, respektive 7 530 ppm při alternativním postupu. Obě hodnoty lze považovat za velmi nebezpečné i při krátké expoziční době. Dle uvedené hodnoty modelace ALOHA by v rozmezí této vzdálenosti byl stále viditelný hustý oblak plynu, který je ale popisován jen v blízkosti zdroje úniku.

V rámci zabezpečení oblasti byla v okruhu 1 míle od havárie vytvořena bezpečnostní uzávěra a v této oblasti proběhla plošná evakuace osob. V uvedené oblasti se dle modelací po směru větru vyskytovala nebezpečná koncentrace látky, nicméně je nezbytné vzít v potaz i po jakou dobu mohla látka v prostředí setrvat, než došlo k její disperzi. Při vyhodnocení modelací softwarový nástroj TerEx časovou osu neuvádí. Nástroj ALOHA ji uvádí při výpočtu koncentrace látky v určitém bodě a dle výsledku modelace by se v oblasti uzávěry dostala koncentrace chloru na bezpečnou úroveň přibližně po 15 minutách od vzniku havárie. Samotná uzávěra byla vytvořena až 20 minut po havárii a dle predikce softwarového nástroje ALOHA byla tato oblast již bezpečná pro pobyt osob. V této době je ve vyšetřovací zprávě dále uvedeno, že přítomnost hustého oblaku těžkého plynu o vysoké koncentraci byla pouze v bezprostřední blízkosti havarované cisterny [103].

Ve zprávě je dále popisován zásadní vliv Auto-Refrigeration efektu, který výrazně omezil rychlost úniku látky a v jeho důsledku nedošlo k úniku celého objemu cisterny. V této oblasti se výsledky modelace modulu DEGAS výrazně liší od reálných podmínek, jelikož dle nastavených hodnot uvádí rychlost úniku 178,7 kg/s. Reálná rychlost ale byla téměř 10krát tak vysoká. Pokud by se vypočtená rychlost úniku více přibližovala reálným podmínkám, lze předpokládat větší podobnost s výsledky nástroje ALOHA, ale rovněž jejich nižší věrohodnost. Na základě komparace výsledků modelací s reálnými podmínkami havárie lze konstatovat, že i přes uvedené nedostatky dosahují přesnějších a realističtějších predikcí výsledky modulu DEGAS.

Modelace chemické havárie ve městě Tavaux

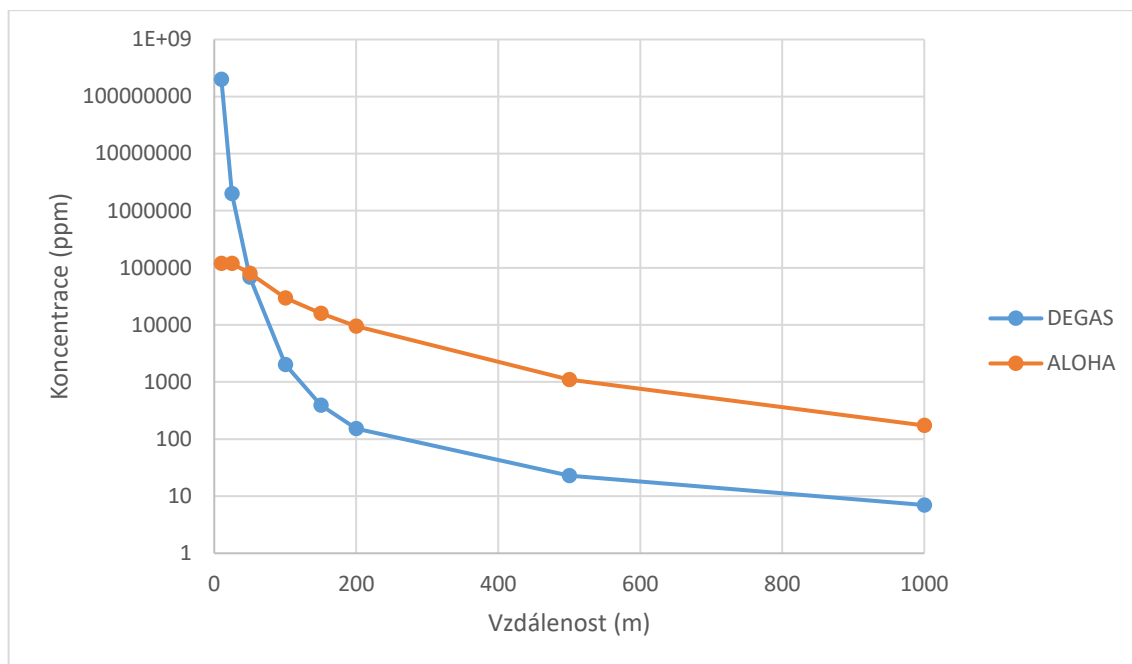
Pro účely modelace dané události byly meteorologické podmínky převzaty z měřicího stanoviště Dole-Jura airport station, které se nachází přibližně 2 km vzdušnou čarou od samotného chemického závodu. Dostupná data jsou pro den havárie neúplná a k dispozici jsou pouze částečná měření z dopoledních hodin. Samotné směrodatné časy měření jsou k dispozici ve 3:00 a 9:00 hod. Událost se ovšem odehrála v 5:09 hod. Všechna měření pro dané datum jsou konzistentní a uvedené hodnoty v různých časech jsou velmi podobné. Z tohoto důvodu byly pro účely modelace použity střední meteorologické hodnoty výše uvedených časů. Druhou podstatnou komplikací vstupních dat modelací je tlak unikající látky, který je vyžadován modulem DEGAS. Tento tlak není ve vyšetřovací zprávě uveden a vzhledem k charakteristice úniku látky při havárii

jej nebylo možné v dané době měřit či odhadovat a pravděpodobně byl pouze nepatrně vyšší než atmosférický tlak. Z tohoto důvodu byl zvolen minimální tlak dané látky, který musí mít při teplotě 3 °C, aby byla v plně nasyceném plynném skupenství. Reálně mohl být tlak ale o něco vyšší. Uvedenou událost lze charakterizovat jako provozní havárii. Vstupní data pro tvorbu jednotlivých modelací jsou uvedena níže:

- lokalita – Usine Solvay de Tavaux (195 m n.m., A);
- den a čas vzniku události – ráno, zima (T), 3. 2. 2004, 5:09 hod (A);
- havarijní model – DEGAS (T), Heavy Gas (A);
- látka – vinylchlorid (CAS 75-01-4), stlačený plyn;
- výška měření povětrnostních podmínek – 10 m;
- teplota vzduchu – 3 °C;
- rychlost a směr větru – 1,1 m/s, z východu, E (A);
- relativní vlhkost – 90 %;
- pokrytí oblohy mraky – 0 %;
- charakter okolní krajiny – obytná/lesnatá krajina, vícepodlažní budovy bez krytí vegetací;
- třída stability atmosféry – F (A);
- typ rozptylu – horizontální únik typu JET (T);
- teplota látky – 3 °C;
- průměr únikového otvoru – průměr 310 mm (0,00031 m²);
- typ únikového otvoru – kruhový otvor (A);
- doba trvání úniku – 211 s;
- přetlak látky v zařízení – 103 kPa (15 psig) (T);
- výška únikového otvoru nad zemí – 14 m (pro účely modelace 0 m);
- objem uniklé látky – 1 585 kg;
- rychlost úniku – 7,5 kg/s (A) [104, 111, 112].

Tabulka 12: Výsledky modelace havárie ve městě Tavaux

| Vzdálenost od zdroje | DEGAS | ALOHA |
|---|--|--|
| 10 m | 510 000 000 mg/m ³ , 199 400 000 ppm | 304 000 mg/m ³ , 119 000 ppm |
| 25 m | 5 110 000 mg/m ³ , 1 998 000 ppm | 304 000 mg/m ³ , 119 000 ppm |
| 50 m | 175 000 mg/m ³ , 68 425 ppm | 205 000 mg/m ³ , 80 200 ppm |
| 100 m | 5 150 mg/m ³ , 2 013 ppm | 75 450 mg/m ³ , 29 500 ppm |
| 150 m | 1 000 mg/m ³ , 391 ppm | 40 660 mg/m ³ , 15 900 ppm |
| 200 m | 390 mg/m ³ , 152 ppm | 24 250 mg/m ³ , 9 480 ppm |
| 500 m | 60 mg/m ³ , 23 ppm | 2 813 mg/m ³ , 1 100 ppm |
| 1000 m | 18 mg/m ³ , 7 ppm | 442 mg/m ³ , 173 ppm |
| Koncentrace látky | DEGAS | ALOHA |
| 4 800 mg/m ³ , 1876 ppm (IDLH) | 103 m | 409 m |
| 50 mg/m ³ , 20 ppm | 561 m | 2,2 km |
| 12 300 mg/m ³ , 4800 ppm (AEGL 3) | 63 m | 277 m |
| 3 100 mg/m ³ , 1200 ppm (AEGL 2) | 140 m | 485 m |



Obrázek 13: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Tavaux

Z výsledků uvedených v tabulce 12 a na obrázku 13 jsou patrné obdobné výsledky jako u předchozích dvou modelací a shodně se zde projevují omezení a nedostatky jednotlivých matematických modelů. V blízkosti zdroje úniku udává model DEGAS velmi vysoké, až fyzikálně nerealistické hodnoty koncentrace látky. Jelikož se jedná o trend u všech modelací, lze deklarovat, že se jedná o způsob výpočtu poklesu koncentrace látky v závislosti na vzdálenosti od zdroje úniku, který je podobný logaritmické křivce a vyobrazení maximální koncentrace není omezeno při hodnotě dosahující 100 % koncentrace látky v ovzduší. Na druhou stranu výsledky softwarového nástroje ALOHA dle metodicky zvoleného postupu poukazují na limitaci maximální koncentrace látky v blízkosti zdroje úniku a k jejímu poklesu dochází až následně. Uvedený trend lze sledovat i v případě výsledků modelace předchozí havárie.

Při komparaci výsledků obou modelů je patrný rozdíl v udávaných hodnotách ve všech sledovaných vzdálenostech i ve vypočtených vzdálenostech dle stanovené koncentrace látky. Míra rozdílnosti výsledků převyšuje stanovenou hranici 10 %. Výsledky jsou nejvíce ve vzájemné shodě pouze ve vzdálenosti 50 m od zdroje úniku. Následně model DEGAS udává výrazně větší pokles koncentrace látky v prostoru. Dalším zásadním rozdílem obou modelací je rychlost úniku látky, stejně jako v předchozích případech. DEGAS tuto rychlost vypočetl na 0,13 kg/s, což je výrazný rozdíl oproti reálné hodnotě.

Výstupy modelací obou softwarových nástrojů, včetně grafického zanesení úniků na mapový podklad, jsou uvedeny v příloze 6.

Oproti předchozím haváriím je tato událost mírně odlišná, konkrétně ve výšce zdroje úniku nad zemí. V předchozích modelacích se jednalo o úniky v malé výšce, ale v tomto případě byl zdroj úniku 14 m nad zemí. Jelikož jsou matematické modely použitých softwarových nástrojů koncipovány pro modelaci úniku a šíření těžkého plynu v minimální až nulové výšce nad zemí, bylo nezbytné v modelacích upravit tuto výšku na 0 m. Oba nástroje v určité míře umožňují modelovat i únik ve vyšší výšce, ale výsledné modelace jsou provedeny mírně odlišným způsobem, než jaký byl metodicky vymezen v této práci. ALOHA pro tyto účely používá Gaussovský model, jehož přesnost je oproti modelu Heavy Gas výrazně nižší. Modul DEGAS umožňuje modelaci vertikálního typu úniku, pro který je nezbytné zvolit výšku výtrysku látky. Výsledky obou alternativních způsobů modelací udávají mírně odlišné hodnoty, než jaké jsou uvedeny v tabulce 12. Pokud bychom v nástroji ALOHA nastavili Gaussovský model a výšku úniku na udávaných 14 m nad zemí, dojde k predikci výraznější disperze plynu v prostředí a model předpokládá i postupné sesedání plynu k zemskému povrchu. K tomuto jevu dojde až v určité vzdálenosti od zdroje úniku a tím alternativně dojde ke zpřesnění výsledků, které jsou udávány do nižších vzdáleností oproti modelu Heavy Gas při této specifické modelaci. Výsledky uvedeného postupu alternativní modelace nejsou přímo porovnatelné s výsledky modulu DEGAS.

Nedostatkem pro přesné vyhodnocení modelace a komparace s reálnými podmínkami sledovanými při havárii je absence přesného umístění zdroje úniku v podniku, který ve vyšetřovací zprávě není blíže uveden. Pro zakreslení úniku na mapový podklad byla na základě mapové analýzy podniku vybrána budova, která je podobná uvedenému popisu a vyobrazení technologií ve vyšetřovací zprávě. Je ovšem nezbytné si uvědomit, že se jedná o jeden z největších chemických závodů ve Francii a lokalita nemusí být přesná. Tento nedostatek není pro účely modelace předmětný, ale je validní pro komparaci výsledků modelací s popisem úniku a jeho dopadů ve vyšetřovací zprávě. Tato zpráva uvádí hodnoty měření koncentrace unikající látky, které byly zaznamenány v objektu, u něhož k úniku došlo. Zároveň jsou zde uvedeny hodnoty měření z vedlejšího objektu, u kterého není známo, jak daleko se nacházel od zdroje úniku. Obecně lze předpokládat, že vzdálenost obou objektů od sebe byla v řádu maximálně desítek

metrům, jelikož v obou probíhaly obdobné výrobní procesy. Ve zprávě jsou dále uvedeny výsledky soudobé modelace zkoumaného úniku, které poskytují dostatečné informace pro jejich komparaci s modelacemi vytvořenými v této práci [104].

Dle vyšetřovací zprávy analyzované chemické havárie [104] byla v primárně zasažené výrobní hale detekována koncentrace unikající látky 2 763 ppm po dobu kratší než 20 minut. Detekovaná koncentrace v druhé výrobní hale byla 22 ppm po dobu kratší než 20 minut. Uvedené hodnoty nelze s výsledky modelací přímo komparovat, jelikož lokalizace budov není uvedena a měření hodnot probíhalo uvnitř výrobních hal. Koncentrace, která pronikla dovnitř, byla výrazně nižší než koncentrace ve vnějším prostředí. Pokud bychom uvažovali vzdálenost druhé haly 100 m od zdroje úniku, nacházela by se ve vnějším prostředí vysoká koncentrace látky, která dle modulu DEGAS hraničí s koncentrací IDLH. Modelace ALOHA udává v této oblasti více jak 10krát vyšší koncentraci látky. Nástroj ALOHA dále disponuje možností predikce koncentrace látky penetrující do budov v konkrétním bodě a v této oblasti udává vnitřní koncentraci 512 ppm, která je výrazně vyšší oproti reálným naměřeným hodnotám při havárii. ALOHA dále umožňuje zobrazení časové osy úniku v konkrétním bodě a v oblasti blízkého pole do 100 m udává, že se látka bude v prostředí vyskytovat maximálně po dobu 10 minut, než dojde k její úplné disperzi. Ve střední vzdálenosti do 200 m udává výskyt po dobu maximálně 15 minut a ve vzdáleném poli do 1 000 m po dobu přibližně 40 minut. Vzhledem k předpokládané dispozici obou výrobních hal v areálu lze konstatovat, že časové výpočty a předpoklad dynamiky disperze látky v prostředí se shodují s měřeními a časovými údaji uvedenými ve vyšetřovací zprávě havárie.

Výsledky zde provedených modelací lze směřodatně komparovat se soudobou modelací analyzovaného úniku, která byla zaměřena na výpočet nebezpečné vzdálenosti dle hodnotící koncentrace NOEL (No Observable Effect Level). Hodnota této koncentrace pro vinylchlorid je určena na 8 000 ppm [113]. Dle výpočtu byl vytvořen oblak plynu unikající látky, který udávané koncentrace dosahoval ve výšce 6 m, šířce 7 m a délce 42 m [104]. Z uvedených parametrů lze komparovat s výsledky zde vytvořených modelací pouze dosah koncentrace v přímé vzdálenosti od zdroje úniku, jelikož jsou prezentované výsledky obou použitých softwarových nástrojů zaměřeny primárně na dosah látky v prostoru v ose x a částečně v ose y. Matematické modely, které tyto nástroje používají, však umožňují vypočítat a znázorňovat vytvořený oblak těžkého plynu

ve všech třech osách, ale tato úroveň výsledků není uživateli poskytnuta. Modul DEGAS udává vzdálenost od zdroje úniku při koncentraci 8 000 ppm na 75 m a ALOHA na 218 m. Oba výsledky vysoce převyšují udávanou vzdálenost dle původní modelace. Lze ale konstatovat, že výsledek modulu DEGAS je s původní modelací v podstatně větší shodě než výsledek nástroje ALOHA. Úroveň komparace s původní modelací vytvořenou prostřednictvím softwarového nástroje PHAST, která je uvedena ve vyšetřovací zprávě, není úplná, jelikož není zcela známa metodika této modelace. Z uvedených výsledků lze předpokládat, že byla v některých ohledech podobná metodice vytvořených modelací v této práci. Jediným zásadním rozdílem původní modelace oproti zde vytvořeným je výška zdroje úniku, která byla v původní modelaci nastavena na reálnou hodnotu 14 m nad zemí. Nejistotu výpočtů obou prezentovaných modelací zvyšuje navíc fakt, že se únik odehrál v silně urbanizované krajině, uvnitř průmyslového areálu, kde se při disperzi oblaku těžkého plynu mohly uplatňovat další fyzikální jevy spojeny s proměnlivostí meteorologických podmínek a specifickým prouděním vzduchu. Jedná se o jeden z faktorů rozdílnosti výsledků modelací s empirickými poznatky z místa havárie.

5.2.3 Vyhodnocení modelací úniku a šíření těžkých plynů v podmínkách vybraných chemických havárií a jejich validita

Na základě výsledků výše prezentovaných modelací vybraných chemických havárií a jejich komparace lze konstatovat, že oba sledované matematické modely popisující šíření těžkých plynů v atmosféře udávají v rámci možností kvalitní výstupy, které jsou využitelné pro orientační odhad šíření plynných látek v prostředí. Oba modely jsou ovšem výrazně zatíženy řadou nedostatků a omezení, které pramení z nutnosti zjednodušeného popisu šíření látek v atmosféře a vnímání externích faktorů, aby bylo realistické modelace vytvořit v běžných podmínkách. V tomto ohledu je nezbytné řadu faktorů zobecnovat či zjednodušovat, zejména popis a implementace meteorologických a terénních faktorů do jednotlivých modelů. Výsledkem jsou orientační modelace šíření a disperze těžkého plynu v atmosféře, které nelze vnímat jako zcela korektní. Směrodatnými výstupy jsou zejména orientační predikce dosahu chemické látky o určené koncentraci v ose úniku po směru větru.

V predikci dosahu úniku chemické látky o určené koncentraci i predikci koncentrace látky v určeném bodě se oba zkoumané matematické modely ve většině případů výrazně rozcházejí ve svých výsledcích. Tyto rozdíly jsou mimo jiné dány odlišným přístupem

k tvorbě modelací a rozdílnými požadavky na vstupní údaje obou použitých softwarových nástrojů a jejich matematických modelů. Dle výsledků modelací dopadů zkoumaných chemických havárií a stanovených koncentrací, oblastí blízkého pole, střední vzdálenosti a vzdáleného pole, se výsledky ve většině případů vzájemně lišily o více jak 10 %, což byla metodicky stanovená hladina významnosti. Pouze u havárie ve městě Festus byla míra rozdílnosti ve vzdálenosti 1 km od zdroje úniku a ve vypočtených vzdálenostech sledovaných koncentrací menší než stanovená hladina významnosti. Výsledky byly v tomto ohledu ve vzájemné shodě. Při této havárii se rovněž vypočtená rychlost úniku modulem DEGAS nejvíce přibližovala reálným podmínkám. V ostatních případech udával softwarový nástroj ALOHA vyšší sledované hodnoty v oblasti vzdáleného pole i výpočtu vzdálenosti dle určených koncentrací oproti modulu DEGAS. Tyto výstupy se shodují s výsledky verifikačních modelací realizovaných v rámci projektu DEGAS, kde byly výsledky rovněž rozdílné o více než 10 %, kromě vzdálenosti 150 m od zdroje úniku v porovnání s modelací ALOHA 2.

Oba softwarové nástroje při komparaci výsledků modelací s podmínkami reálných havárií vykazují shodně řadu nedostatků, které snižují míru realističnosti jejich predikce. Zásadním nedostatkem je výpočet směru šíření látky pouze difúzním mechanismem ve směru proudění větru. Pokud by došlo k úniku typu JET v jiném směru, nedokázaly by modely tento únik řádně zanezt do prostředí a v tomto směru adekvátně omezit, než dojde k převýšení síly proudění větru nad silou výtrysku látky ze zařízení. V tomto ohledu je vyhodnocení a možnost zanesení výsledku na mapový podklad variabilnější v nástroji TerEx, který umožňuje na mapovém podkladu libovolně upravit směr šíření látky. V nástroji ALOHA je směr větru zadáván již při tvorbě modelace a variabilně s ním lze pracovat pouze při přenastavení vstupních parametrů nebo v terénních podmínkách při připojení kompatibilní meteostanice. Tyto postupy jsou ale bez ovlivnění zmiňovaného výpočtu. Z pohledu vyhodnocení modelací udává softwarový TerEx přehlednější soupis informací. Naproti tomu nástroj ALOHA nabízí širší možnosti analýzy výsledků, včetně uvedení časové osy a predikce penetrace látky do budov při analýze koncentrace látky v konkrétním zvoleném bodě ve vypočtené zóně úniku.

Dalším zásadním nedostatkem je absence výpočtu či predikce šíření látky mimo osu úniku do ostatních směrů, kdy je zejména při události ve městě Graniteville popisováno značné šíření látky i do ostatních směrů, které modely nedokáží řádně predikovat.

Při zadání výsledků krátce trvajících modelací na mapový podklad je v nástroji ALOHA vyobrazena i minimální oblast kopírující kružnici kolem zdroje úniku o variabilním průměru dle vstupních parametrů modelace. Její vymezení je ale u havárie ve městě Graniteville nedostatečné při komparaci s reálnými podmínkami. Při události ve městě Festus byl sledován obdobný jev, ale s menší mírou významnosti z důvodu terénních překážek a vegetace v ostatních směrech. Třetím nedostatkem obou nástrojů je samotná tvorba modelací a náročnost na vstupní data. V podobě, ve které byly modelace vytvořeny, bylo pracováno se značným objemem vstupních dat, které v průběhu reálné události nebudou zpravidla k dispozici. Tvorba komplexních modelací je tedy možná zejména v rámci retrospektivní analýzy již proběhlých událostí nebo při plánování a prevenci jakožto součásti chemické bezpečnosti a analýzy rizik, kdy lze všechna požadovaná data získat či odvodit. Pro případ probíhající chemické havárie umožňují oba nástroje tvorbu modelace i s určitým nedostatkem vstupních údajů, u kterých bude výsledek výrazně méně přesný a jeho využitelnost omezená.

Dle prezentovaných výsledků je validita softwarových modelací úniku a šíření těžkých plynů v prostředí pouze částečná, a to zejména vzhledem k ose úniku látky ze zdroje a směru proudění větru. Dle sledovaných havárií docházelo k částečnému úniku látky i do ostatních směrů mimo proudění větru, což modelace nedokáží řádně predikovat. Z pohledu řešení chemických havárií je ovšem nezbytné provádět opatření ochrany obyvatelstva ve všech potencionálně zasažených oblastech v okolí zdroje úniku. Modelace mohou v tomto ohledu v určité míře sloužit jako návod, na jakou oblast se blíže zaměřit a v jaké zóně plánovat či provádět například úkony chemického průzkumu k verifikaci koncentrace látky v prostředí a z ní odvoditelné nebezpečnosti. Podstatným faktorem je i sledování časové osy, jelikož u jednorázových či krátce trvajících úniků nebezpečných chemických látek a směsí bude docházet k jejich poměrně rychlé disperzi v závislosti na konkrétní látce a externích faktorech. V době, kdy bude reálné komplexní zahájení úkolů ochrany obyvatelstva, již může většina ohrožení pominout, což prezentuje analyzovaná havárie ve městě Graniteville. U déle trvajících úniků tento jev neplatí a lze se setkat i s déle trvajícím kontaminací a výskytem látky o vysoké koncentraci v prostředí, jak prezentuje analyzovaná havárie ve městě Festus. Šíření látky v prostředí ve formě těžkého plynu je v tomto případě podstatně více ovlivněno zejména možnými proměnnými meteorologickými podmínkami a zasažená oblast může být o to rozsáhlejší. Tento typ havárie ovšem poskytuje delší čas na přípravu a provedení ukrytí, respektive

následné evakuace obyvatel. Naproti tomu zasažené osoby mohou být vystaveny nebezpečné látce po delší dobu a stanovená nebezpečná koncentrace látky se obecně snižuje se zvyšující se expoziční dobou.

Jako nedostatek modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx lze na základě výsledků výše provedených modelací identifikovat absenci nastavení maximální koncentrace látky v prostředí při grafického vyhodnocení. Tento fakt může být pro uživatele matoucí, ale nejedná se o funkční problém, nýbrž o způsob stanovení úrovně následného poklesu koncentrace látky v prostoru. Praktickým problémem je výpočet rychlosti úniku látky na základě zadaných parametrů, jež se ani v jednom z analyzovaných případů chemických havárií neshodoval s reálnou rychlostí úniku a ve všech případech byla udávána hodnota nižší. Stejný rozdíl byl sledován i v rámci verifikační modelace projektu DEGAS. Ve svých výsledcích dále neuvádí údaj o výpočtu celkového uniklého množství látky. I přes tyto nedostatky se výsledky modelací prostřednictvím modulu DEGAS jeví jako realistické ve všech sledovaných oblastech a nejvíce se shodují s reálnými podmínkami analyzovaných chemických havárií i experimentálního šetření projektu DEGAS. Pro důkladnější analýzu výsledků modelací absentuje v nástroji TerEx uvedení časové osy, která by umožňovala zhodnotit časovou posloupnost šíření látky v prostředí a dobu kontaminace v předem definované vzdálenosti od zdroje úniku.

Jako nedostatek modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA lze na základě výsledků výše provedených modelací identifikovat nevěrohodnost výpočtu koncentrace látky v oblasti blízkého pole, kdy udává limitní koncentraci, která je proměnná až v určité vzdálenosti od zdroje úniku. Zde je ovšem nezbytné uvažovat způsob tvorby modelace, kdy nástroj ALOHA umožňuje dva základní postupy. Buď nastavení konstantní rychlosti úniku z přímého zdroje nebo únik ze zásobníku, který dle modelací projektu DEGAS vykazuje přesnější odhad koncentrace látky v oblasti blízkého pole. Tento postup ale není univerzálně vhodný, jelikož vyžaduje zadání přesných parametrů chemického zásobníku a dle výsledků modelace projektu DEGAS udává vyšší rychlost úniku i dosah látky o určené koncentraci, než způsob modelace z přímého zdroje. Z pohledu chemické bezpečnosti a ochrany obyvatelstva je ale nadhodnocený výsledek vhodnější než potencionálně podhodnocený, jelikož na něm může částečně záviset plánování či provedení úkolů ochrany obyvatelstva záchrannými složkami, zejména ukrytí a evakuace obyvatelstva. Primárním nedostatkem modulu Heavy Gas je výpočet vyšší

koncentrace látky v oblasti vzdáleného pole, kdy se udávané výsledky komparativních modelací dopadů vybraných chemických havárií jeví jako nadhodnocené oproti výsledkům modulu DEGAS i reálným podmínkám zkoumaných havárií. Na druhou stranu lze u nástroje ALOHA kladně hodnotit možnost detailnějšího vyhodnocení výsledků, kdy umožňuje zobrazení vývoje koncentrace látky v prostoru dle časové osy v předem definovaném bodě zasažené zóny a rovněž predikuje vývoj koncentrace látky penetrující do budov.

Obecně vykazují prezentované výsledky největší věrohodnost při modelaci provozní havárie s relativně malou a konstantní rychlostí úniku látky ze zdroje trvající delší dobu. Celkově lze na základě uvedených výsledků a jejich komparace s dopady reálných chemických havárií konstatovat, že modul DEGAS udává přesnější a věrohodnější výsledky ve všech sledovaných oblastech než model Heavy Gas nástroje ALOHA. Výsledky modelací obou použitých softwarových nástrojů jsou však značně zatíženy faktory ovlivňujícími rozptyl a šíření těžkých plynů v atmosféře a s nimi spojenými limity a nedostatky softwarových modelací, které jsou analyzovány v teoretické části práce. Shrnutí výsledků ve formě kladů a záporů jednotlivých softwarových nástrojů, potažmo analyzovaných matematických modelů je uvedeno v tabulce 13.

K níže uvedené tabulce lze pro oba analyzované softwarové nástroje a matematické modely doplnit, že jejich společným kladem je využitelnost výsledků v rámci chemické bezpečnosti a při přípravě bezpečnostní a havarijní dokumentace, případně i pro vyšetřovací účely chemických havárií. Společným nedostatkem je omezená využitelnost v případě již probíhající chemické havárie, zejména z důvodu náročnosti na objem a kvalitu vstupních dat. V každém případě je výsledky nezbytné brát pouze jako orientační predikci šíření těžkého plynu a jeho disperze v atmosféře. Jako shodné nedostatky lze dále identifikovat zjednodušené pojetí externích faktorů a jejich možné proměnlivosti. Dále omezenou možnost kalkulace se zdrojem úniku ve výšce a nemožnost modelace se zdrojem v uzavřeném prostoru.

Tabulka 13: Shrnutí kladů a záporů analyzovaných softwarových nástrojů a matematických modelů

| Softwarový nástroj, model | Klady | Zápory |
|----------------------------------|---|---|
| TerEx, DEGAS | Udává realistickou predikci šíření těžkého plynu v prostředí. | Udává podhodnocený výpočet rychlosti úniku a neuvádí celkové uniklé množství látky. |
| | Uživatelsky jednoduchý při tvorbě modelací. | Neuvádí časovou osu úniku. |
| | Přehledná prezentace výsledků. | Nemožnost predikce šíření látky mimo osu úniku. |
| | Variabilita při zanesení výsledků na mapový podklad. | Pro oblast blízkého pole generuje až nerealistické hodnoty koncentrací. |
| ALOHA, Heavy Gas | Široké a variabilní možnosti analýzy výsledků. | Výsledky modelací jsou nadhodnoceny oproti reálným podmínkám, zejména pro oblast vzdáleného pole. |
| | Při hodnocení koncentrace látky v určeném bodě uvádí časovou osu a predikci penetrace do budov. | Velmi omezená možnost predikce šíření látky mimo osu úniku. |

5.3 Stanovení doporučení k využití softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře v oblasti chemické bezpečnosti a ochrany obyvatelstva

Na základě výše prezentovaných výsledků a jejich interpretace lze stanovit následující soubor doporučení pro využití softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře. Z pohledu modelací jsou doporučení koncipována pro využití zejména softwarových modelačních nástrojů TerEx, modulu DEGAS a nástroje ALOHA, modelu Heavy Gas. Samotná doporučení jsou zaměřena na možné využití modelací v oblasti ochrany obyvatelstva, chemické bezpečnosti a složkami IZS při přípravě na řešení a při řešení chemických havárií v rámci provádění záchranných a likvidačních prací a stanovení adekvátních opatření.

- Softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře je vhodné využít zejména pro účely analýzy rizik, přípravy bezpečnostní dokumentace a retrospektivní analýzy chemických havárií.
 - Modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí lze doporučit pro implementaci do bezpečnostní dokumentace a analýzy rizik všech objektů skladujících nebezpečné chemické látky a směsi, jejichž plyny a páry vykazují nebezpečné vlastnosti pro životy a zdraví osob, zvířata a životní prostředí.
- Softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu lze doporučit primárně pro modelaci a analýzu úniků ve vnějším prostředí, přičemž je vhodné kalkulovat se zdrojem úniku v nulové výšce nad zemí.
- Softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí v současném pojetí a dle aktuálních možností modelačních softwarových nástrojů jsou pouze omezeně vhodné pro využití složkami IZS při řešení již probíhající chemické havárie a při provádění záchranných a likvidačních prací.
- Výsledky softwarových modelací je nezbytné brát orientačně a vždy je zapotřebí jejich bližší interpretace v konkrétním prostředí s přihlédnutím k místním meteorologickým podmínkám a ke skladbě okolního terénu.

- V rámci vyhodnocení výsledků modelací lze doporučit sledování tří oblastí v okolí zdroje úniku a koncentrace látky v těchto zónách, oblast blízkého pole do 100 m od zdroje úniku, oblast střední vzdálenosti do 200 m a oblast vzdáleného pole do 1 000 m a více.
 - V oblasti blízkého pole lze při chemických haváriích doporučit plánování/provedení bezodkladného ukrytí a následné evakuace osob bez ohledu na závažnost havárie. V ostatních oblastech lze doporučit varování a ukrytí obyvatel a zvážení následné evakuace či invakuace osob na základě závažnosti chemické havárie.
- Při interpretaci výsledků modelací je nezbytné predikovat charakteristiku úniku a sledovat jeho časovou osu při použití vhodných hodnotících koncentrací, které lze vzít v potaz při plánování a určení opatření ochrany obyvatelstva a postupů realizace záchranných a likvidačních prací.
 - Pro interpretaci výsledků modelací a stanovení oblastí, ve kterých může být nezbytné realizovat opatření ochrany obyvatel a záchranné a likvidační práce, lze doporučit využití hodnotících koncentrací AEGL, ERPG, IDLH, PAC a v podmínkách HZS ČR také HPK a HAU.
 - Pro korektní interpretaci výsledků modelací a predikce koncentrace látky v určité oblasti od zdroje úniku je vhodné využít softwarových databází nebezpečných chemických látek a směsí ke zjištění relevantních informací o látce a doporučení pro záchranné a likvidační práce, včetně doporučení na úroveň individuální ochrany zasahujících osob.
 - Pro jednorázové či krátce trvající úniky lze v rámci hodnotících koncentrací doporučit využití hodnot pro 30minutovou expoziční dobu. Pro déle trvající havárie lze v rámci hodnotících koncentrací doporučit využití hodnot pro 60minutovou expoziční dobu.
- Při vyhodnocení výsledků modelací a při analýze potencionálních následků chemických havárií je nezbytné brát v potaz šíření látky i do ostatních směrů mimo vykreslenou zónu softwarovými nástroji. V tomto případě je nezbytné doplnit stanovení nebezpečné zóny o oblast ohraničenou tvarem kružnice okolo zdroje úniku v minimální vzdálenosti udávané v Řádu chemické služby HZS ČR.

- Při analýze a observaci chemické havárie lze doporučit sledování viditelné fáze oblaku těžkého plynu a směr jeho šíření.
- V okolí zdroje úniku lze doporučit ustanovení nebezpečné zóny ve všech směrech v minimální vzdálenosti 100 m bez ohledu na závažnost havárie.

5.4 Vyhodnocení cílů práce a hypotéz

Primárním cílem disertační práce byla realizace výzkumného a experimentálního šetření projektu DEGAS, na který je práce navázána. Pro splnění tohoto cíle byly uskutečněny dva terénní experimenty, jejichž účelem bylo ověření a analýza chování, rozptylu a šíření těžkého plynu v atmosféře za použití vybraného stopovače v případě jeho úniku z technologického zařízení. Při experimentech byly sledovány faktory a dynamika šíření těžkého plynu v atmosféře, časové změny v průběhu rozptylu oblaku a pomocí série detekčních přístrojů byla měřena jeho charakteristika. Výsledky experimentálního šetření byly v rámci výzkumného projektu následně využity k validaci a verifikaci výstupů projektu DEGAS, mezi kterými bylo vytvoření a nastavení matematického modelu, který byl pod totožným jménem integrován do modelačního softwarového nástroje TerEx. Disertační práce byla dále zaměřena na analýzu výstupů a validity výsledků tohoto modulu při modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí a jejich komparaci s výsledky modelačního softwarového nástroje ALOHA. Výsledky modelací byly blíže komparovány s podmínkami vybraných reálných chemických havárií.

Pro účely disertační práce byly stanoveny čtyři dílčí cíle a tři hypotézy. První cíl byl zaměřen na vymezení problematiky chemické bezpečnosti a chemických havárií, včetně popisu nebezpečných chemických látek a směsí, jejich možných havarijních projevů při úniku a definice těžkého plynu s vymezením způsobu jeho šíření v prostředí. Druhý cíl byl zaměřen na analýzu možností modelace úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v prostředí pomocí vybraných softwarových nástrojů. Dále možných přístupů, matematických modelů a vymezení vstupních dat modelací i faktorů ovlivňujících šíření a rozptyl těžkých plynů v atmosféře. Ke splnění těchto dvou cílů byla

koncipována teoretická část disertační práce, která se v jednotlivých kapitolách věnuje vytyčeným tématům.

Třetí cíl byl zaměřen na experimentální ověření a analýzu chování, rozptylu a šíření těžkého plynu za použití vybraného stopovače při terénních experimentech simulujících únik látky z technologického zařízení v rámci validace a verifikace výstupů projektu DEGAS. Ke splnění tohoto cíle bylo realizováno experimentální šetření, které bylo součástí projektu DEGAS a byla provedena analýza jeho výstupů, včetně vytvoření verifikační modelace úniku vybraného stopovače za podmínek sekundárního experimentu pomocí modulu DEGAS. Výsledky modelace byly komparovány s reálnými podmínkami experimentu a observacemi terénního šetření, včetně komparace s výsledky modelací těchto podmínek prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA. Čtvrtým cílem byla analýza validity výstupů modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu na základě analýzy výsledků komparativních modelací pomocí softwarového nástroje TerEx, modulu DEGAS a nástroje ALOHA, modelu Heavy Gas. K tomuto účelu byly vybrány a analyzovány tři chemické havárie různého charakteru, jejichž podmínky byly zaneseny do jednotlivých modelací. Výsledky modelací obou nástrojů byly navzájem komparovány, vyhodnoceny a následně byly porovnány s dopady analyzovaných chemických havárií a dostupnými informacemi z vyšetřovacích zpráv. Na základě výsledků práce byl stanoven soubor doporučení uvádějící možnosti a způsob využití softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí v rámci ochrany obyvatelstva, chemické bezpečnosti a řešení chemických havárií složkami IZS. Tato doporučení byla rovněž zaměřena na organizační a bezpečnostní opatření různého charakteru. Jejich účelem je přispět ke zvýšení potencionální připravenosti složek IZS a ke snížení ohrožení obyvatelstva a životního prostředí v případě chemické havárie spojené s únikem těžkého plynu.

Hypotéza 1: Výsledky terénního experimentu ověřujícího chování, šíření a rozptyl těžkého plynu v atmosféře se shodují s výsledky modelace tohoto experimentu prostřednictvím modulu DEGAS. **Hypotéza byla potvrzena.**

Na základě analýzy výstupů druhého experimentálního šetření projektu DEGAS a jejich komparace s výsledky modelace tohoto experimentu za reálných podmínek prostřednictvím modulu DEGAS lze konstatovat jejich relativní a akceptovatelnou shodu.

Výsledky modelace udávají realistické predikce šíření a disperze použitého stopovače v atmosféře, které se primárně shodují s observacemi při experimentu a částečně s korigovanými a detekovanými hodnotami látky v prostředí.

Hypotéza 2: Výsledky modelace vybraných chemických havárií prostřednictvím modulu DEGAS se neliší o více jak 10 % při komparaci s výsledky modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA. **Hypotéza byla vyvrácena.**

Na základě komparace výsledků modelací analyzovaných chemických havárií prostřednictvím modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx a modelu Heavy Gas nástroje ALOHA lze ve většině sledovaných parametrů konstatovat jejich rozdílnost o více jak 10 %. Relativní shoda v části výsledků byla sledována pouze u první modelované chemické havárie. V případě komparativních modelací dalších chemických havárií byla v ostatních parametrech sledována větší rozdílnost výsledků převyšující stanovenou hladinu významnosti. Obdobný výsledek byl rovněž sledován v rámci komparativních modelací experimentálního šetření projektu DEGAS.

Hypotéza 3: Výsledky modelace šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře prostřednictvím modulu DEGAS a modelu Heavy Gas softwarového nástroje ALOHA věrohodně odpovídají reálným podmínkám analyzovaných chemických havárií. **Hypotéza byla vyvrácena.**

Na základě analýzy dopadů vybraných chemických havárií a jejich komparace s výsledky vytvořených modelací prostřednictvím vybraných softwarových nástrojů a matematických modelů lze konstatovat, že výsledky modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí a jejich disperze v atmosféře věrohodně neodpovídají podmínkám a dopadům analyzovaných chemických havárií. Výsledky modelací a jejich predikce šíření látky v prostředí vykazují řadu nedostatků snižující míru jejich realističnosti. Projevuje se v nich řada nedostatků a omezení pramenících z matematického popisu šíření látky, úrovně implementace externích faktorů a detailnosti zanesení výsledků modelací do konkrétního prostředí. Navzdory identifikovaným nedostatkům udává modul DEGAS přesnější výsledky, které více odpovídají reálným dopadům analyzovaných chemických havárií.

6 DISKUZE

Disertační práce je tematicky zaměřena na možnost modelace rozptylu a šíření těžkého plynu v atmosféře v rámci chemických havárií. K modelaci tohoto jevu existuje řada softwarových modelačních nástrojů, které využívají různé matematické modely a přístupy. Obecně je matematický popis šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře, včetně řady faktorů ovlivňující tento proces, složitý a výsledky softwarových modelací vykazují řadu nedostatků. Výzkum provedený při zpracování této disertační práce je blíže zaměřen na uvedenou oblast a na výstupy projektu DEGAS, na který je práce navázána. Dále na analýzu validity výsledků modelací dopadů chemických havárií prostřednictvím modulu DEGAS, který vznikl jako jeden z výstupů uvedeného projektu.

Součástí projektu DEGAS byla realizace dvou terénních experimentů, jejichž účelem bylo na základě observace a měření vytvořit podklady, které posloužily k lepšímu pochopení procesů uplatňujících se při šíření a disperzi těžkých plynů v atmosféře. Dále byly využity k doladění modulu DEGAS, jehož základy vycházejí z matematického modelu SLAB. Tento model byl doplněn zejména o koeficient disperze plynu v prostředí, který je funkcí vzdálenosti od zdroje úniku a celkově zpřesňuje výsledky modelací. Samotné experimentální šetření a jeho koncepce byla poměrně ojedinělá. První experimentální šetření mělo metodický charakter a bylo primárně zaměřeno na přípravu a ověření stanovené metodiky. Při druhém, hlavním experimentu, byla simulována havárie cisterny s následným únikem celého objemu její kapacity. Z obecného hlediska se jedná o validní námět experimentu, který vycházel z reálných podmínek. Oblast chemické bezpečnosti je primárně zaměřena na stacionární zdroje ohrožení ve formě bezpečnostní dokumentace a dalších opatření různého charakteru, ale mobilní zdroje nelze v tomto ohledu opomíjet. Řada historických událostí poukázala na nebezpečnost tohoto zdroje, která je ve městech a aglomeracích o to významnější. Havárie uvedeného typu rovněž nedávají příliš prostoru na přípravu procesů a postupů, které by byly univerzálně uplatnitelné s cílem minimalizace dopadů chemické havárie vzniklé mimo stacionární zařízení. Softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí jsou zaměřeny na obě uvedené oblasti a výsledky modelací lze aplikovat primárně při přípravě bezpečnostní dokumentace a analýzy rizik chemických zařízení. V určité míře je lze využít i jako podpůrný nástroj při řešení probíhající chemické havárie

či k vytvoření retrospektivních analýz. Výstupy projektu DEGAS a výzkumné části disertační práce lze v uvedených podmínkách chemické bezpečnosti aplikovat.

Experimentální šetření a terénní experimenty projektu DEGAS

Po metodické stránce mělo realizované experimentální šetření několik omezení, které částečně zúžily spektrum získaných výsledků. Jedním z předpokladů při komplexním monitorování experimentu bylo využití termokamer ke snímání teploty unikajícího stopovače těžkého plynu. Na základě prvního experimentálního šetření bylo zjištěno, že použitý typ zařízení nedokáže unikající plyn snímat a měřit jeho teplotu. Bylo možné zaznamenat pouze teplotu jednotlivých tlakových lahví. Původním záměrem bylo zjistit, zda a v jaké míře se při úniku oxidu uhličitého uplatňuje Joule-Thomsonův jev a stanovit úroveň poklesu teploty látky při úniku. Při výskytu tohoto jevu je obecně známo potenciaální ohrožení osob vznikem omrzlin v případě, že dojde k jejich přímému zasažení unikajícím plynem v bezprostřední blízkosti zdroje úniku. Příčinou usmrcení osob v tomto případě ale bývá zadušení, respektive fatální intoxikace unikající látkou [114]. Při použití vhodného typu termokamery k monitoraci uvedeného jevu by bylo možné určit oblast a vzdálenost od zdroje úniku, ve které se mohou zdravotní dopady uvedeného typu u zasažených osob vyskytovat. Možným typem vhodné termokamery je například Workswell FLIR GIS-320, který požadovanou funkcionalitu umožňuje, ale pořizovací náklady jsou extrémně vysoké [115]. Z pozorování při jednotlivých experimentech lze konstatovat, že uvedený typ ohrožení je v blízkosti výtrysku plynu ze zařízení relevantní. Při prvním experimentu bylo monitorováno snížení teploty tlakových lahví na teplotu až $-15\text{ }^{\circ}\text{C}$. Při druhém experimentu byla patrná námraza na zemi v oblasti přibližně 5 m od zdroje úniku v místě, kde plyn dosedal k povrchu. Nelze však přesněji určit, do jaké vzdálenosti je toto ohrožení relevantní.

Druhým metodickým nedostatkem byl počet a typ použitých detekčních přístrojů. Zvolené detekční přístroje se při prvotním experimentu prokázaly z pohledu jejich funkcionalit pro měření koncentrace oxidu uhličitého v daných podmínkách jako vhodné a spolehlivé. Byly schopné kontinuálně pracovat v experimentálních podmínkách a umožňovaly dostatečně detailní záznam měření. Zásadním nedostatkem byl ale jejich detekční rozsah, který umožňoval validní měření pouze do maximální koncentrace mírně převyšující 10 000 ppm. Po překročení této hranice byl detekční senzor zahlcen, ale měření stále umožňoval při snížené kvalitě měřícího signálu. Základní chyba měření

dosahovala při experimentech úrovně přibližně 10 %. Větší přesnosti měření obecně dosahují přístroje s nižším detekčním rozsahem, respektive s větší citlivostí [60]. Pro účely experimentů byl ale přednější detekční rozsah.

Při druhém experimentu se detekční rozsah použitých přístrojů projevil jako nedostatečný, konkrétně u přístrojů, které byly umístěny v blízkosti zdroje úniku. Zde byla odhadována mnohonásobně vyšší koncentrace látky, než jakou umožňovaly přístroje měřit. V posledních dvou řadách detektorů se detekční rozsah projevil již jako dostačující. Ke zkvalitnění měření by bylo vhodné v blízkosti zdroje úniku použít detekční přístroje, které umožňují měření koncentrace řádově ve stovkách tisíc ppm. V tomto ohledu je vhodná detekční metoda NDIR, která umožňuje tvorbu a kalibraci detekčních čidel pro měření nulové až absolutní koncentrace oxidu uhličitého. Jedná se například o detektory společnosti CO2Meter nebo Gas Sensing Solutions [116, 117]. V případě uvedených detektorů se ale nejedná o kompletní řešení detekčního přístroje, nýbrž pouze o detekční čidla, která je nezbytné do přístrojů zabudovat. Celkově je pak také otázkou dostupnost a pořizovací cena kompletního přístroje, který by umožňoval požadovanou funkcionalitu. Z tohoto důvodu byly pro experimentální šetření zvoleny detekční přístroje značky Lutron, rovněž fungující na principu uvedené detekční metody, které disponovaly veškerými požadovanými funkcionalitami. Jednalo se v tomto případě o kompromisní řešení mezi validitou měření, dostupností a cenou těchto detekčních přístrojů. Aby bylo posléze možné získat validní představu a odhad reálné koncentrace látky, která se v experimentálním prostředí vyskytovala, byly naměřené hodnoty korigovány. Pro korekci hodnot v blízkém poli byly využity naměřené hodnoty a softwarové modelace prostřednictvím nástroje ALOHA. Tyto hodnoty byly rovněž částečně použity k doladění modulu DEGAS a ke zpřesnění výpočtu distribuce koncentrace látky a její disperze v oblasti blízkého pole.

Únik, šíření a disperze těžkého plynu v atmosféře je dynamický děj, na který mají vliv interní faktory unikající látky, její fyzikální a chemické vlastnosti, dynamika úniku, hybnost a další, ale také externí, meteorologické podmínky, turbulentní proudění vzduchu a charakteristika okolního terénu. Dynamika úniku není konstantní a v průběhu úniku se v závislosti na změně tlaku a teploty látky uvnitř zařízení jeho rychlost snižuje. Tento fakt potvrzuje i vizualizace druhého experimentu a jednotlivých měření v čase a prostoru. Na jednotlivých mapách vyobrazených na obrázku 9 je patrná nesouměrná distribuce

a fluktuace koncentrace látky v prostoru a čase v průběhu experimentu. V pozdějších fázích měření lze pozorovat tvorbu oblastí, menších shluků oblak těžkého plynu, o vyšší koncentraci. Rychlost reakce použitých detekčních přístrojů na změnu koncentrace látky v prostoru může přesnost jednotlivých měření negativně ovlivňovat, obzvláště pokud došlo na začátku experimentu k přehlcení detekčních čidel. Dynamika úniku byla v iniciální fázi experimentu značná, než došlo po několika minutách k jeho ustálení. Validní měření lze tedy předpokládat až následně po této době.

Vzhledem k rozsahu druhého experimentálního úniku se projevil jako neadekvátní počet použitých detekčních přístrojů. Zvolené stromové schéma rozestavení přístrojů lze vzhledem k charakteristice úniku označit jako vhodné, ale kvůli jejich počtu je bylo možné rozestavit pouze do vzdálenosti 100 m od zdroje úniku. Primárně zde byl předpoklad menšího výronu plynu ze zařízení s dosahem do nižší vzdálenosti. V iniciální fázi experimentálního úniku byl sledován hustý oblak těžkého plynu až do vzdálenosti přibližně 150 m a následně docházelo k jeho postupnému omezení, které bylo dáno dynamikou úniku a poklesem tlaku a teploty látky v zařízení. Pro průběžná měření byl tedy počet přístrojů relativně dostatečný, ale pro měření největší a potenciale nejnebezpečnější části úniku byl počet nedostatečný. Při měření byla na základě uvedeného omezení monitorována pouze oblast blízkého pole. Softwarové modelace úniku nebezpečných chemických látek a směsí se zaměřují i na oblast vzdáleného pole, včetně střední oblasti, která byla zvláště identifikována a využita v této práci. Pro komplexnější měření a větší míru validity výsledků experimentu by bylo vhodné hierarchicky rozmístit adekvátní počet detekčních přístrojů s relevantním detekčním rozsahem až do vzdálenosti minimálně 1 000 m. Naměřená data by poskytla lepší pohled na dynamiku šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře, včetně distribuce koncentrace látky v prostoru a nebylo by nezbytné naměřená data korigovat k získání realistického odhadu koncentrace látky. Lze ale předpokládat, že zvolený postup korekce hodnot přináší dostatečně přesný odhad reálné koncentrace látky v prostoru a v daných podmínkách byl pro následné účely vhodný. Na základě uvedených nedostatků experimentálního šetření lze konstatovat, že v daných podmínkách byly zvoleny adekvátní postupy, které umožnily doladění a zpřesnění výsledků modelací modulu DEGAS a výrazně neovlivnily vyhodnocení stanovené hypotézy 1. Tato hypotéza byla na základě uvedených výsledků práce potvrzena.

Modul DEGAS, který vznikl na základě prezentovaného stejnojmenného projektu jakožto součást expertního modelačního softwarového nástroje TerEx, umožňuje tvorbu komplexních modelací šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře. Celkově tento modul vyžaduje řadu vstupních parametrů, které jsou svým objemem ve srovnání s jinými softwarovými nástroji obdobné. V některých parametrech se však mohou lišit v závislosti na požadavcích zvoleného matematického modelu a přístupu při určení meteorologických podmínek a třídy stability atmosféry. Jednou z rozdílů v případě modulu DEGAS je při kontinuálním úniku látky typu JET výpočet charakteristiky úniku na základě velikosti únikového otvoru, době jeho trvání a přetlaku látky ve skladovacím zařízení. Při komparaci se softwarovým nástrojem ALOHA se jedná o rozdílný přístup. Tento nástroj přejímá tlak látky v zařízení jako nejnižší možný tlak, kdy se látka nachází v plně nasyceném skupenství těsně pod bodem varu (tj. v rovnovážném stavu kapalné a plynné fáze) a ostatní charakteristika je stanovena na základě zadání parametrů zásobníku [66]. Obdobný přístup nabízí modul DEGAS jen v případě modelace jednorázového úniku. Jedná se o jeden z faktorů, který měl vliv na rozdílnost výsledků komparativních modelací prezentovaných v této práci. Celkově lze konstatovat, že nástroj ALOHA vyžaduje při tvorbě modelací větší počet přesnějších vstupních údajů a z tohoto pohledu klade vyšší nároky na tyto údaje oproti modulu DEGAS.

Dle výsledků komparativní modelace druhého experimentu projektu DEGAS je patrný rozdíl ve vypočtené rychlosti úniku oběma použitými softwarovými nástroji. Průměrná rychlost úniku byla na základě analýzy podmínek experimentu stanovena na 375 kg/min s dobou trvání 19 min. Výsledky modelace DEGAS ale udávají rychlost úniku 248 kg/min a ALOHA 1 uvádí 1 950 kg/min po dobu 4 min. V případě modelace ALOHA 2 byla rychlost úniku a doba jeho trvání fixně nastavena. V případě modelace ALOHA 1 byly uvedené hodnoty vypočítány na základě zadaných parametrů chemického zásobníku a jeho naplněnosti. Výsledek této modelace je ve střední vzdálenosti výrazně nadhodnocen oproti reálným podmínkám i oproti ostatním modelacím. Chybný výpočet rychlosti úniku je v tomto případě hlavním faktorem, který vysvětluje rozdílnost ve vypočtených koncentracích i vzdálenostech. V případě modulu DEGAS je vypočtená rychlost úniku naopak podhodnocena, ale ostatní výsledky nejvíce a konzistentně odpovídají reálným podmínkám experimentu. Tento trend je sledován i u ostatních komparativních modelací dopadů vybraných chemických havárií. Uvedené výsledky prezentují jeden z nedostatků modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí,

kdy často dochází k chybě ve výpočtu rychlosti úniku látky, ze které poté plyne relativní chybovost provedených modelací ve výpočtu koncentrace látky v prostoru. Modelace ALOHA 2 selhávala zejména při výpočtu koncentrace látky v oblasti blízkého pole. Při modelaci za podmínek uvedeného experimentu tato modelace rovněž udávala větší úroveň poklesu látky v oblasti vzdáleného pole než modul DEGAS, což v případě ostatních komparativních modelací sledováno nebylo. Rozdílnost výsledků v tomto případě ale není signifikantní. Uvedený jev lze v případě modelace podmínek experimentálního šetření vysvětlit jako možnou anomálii. Faktem ale také je, že nastavený korekční koeficient pro výpočet koncentrace látky v prostoru v modulu DEGAS částečně vychází i ze série modelací vytvořených softwarovým nástrojem ALOHA.

Ve výpočtu koncentrace látky v oblasti blízkého pole udávají při modelaci podmínek experimentálního šetření realistické hodnoty modelace DEGAS a ALOHA 1. Modul DEGAS při modelaci v této oblasti počítá s iniciálním nárůstem koncentrace látky v prostoru na maximální hodnotu, od které se poté hodnoty snižují. Pro odhad koncentrace použitého stopovače v této oblasti byly použity korigované hodnoty. Reálná koncentrace ale byla pravděpodobně ještě vyšší, než udávají tyto hodnoty. Ve výsledcích se korigovaným hodnotám i s přihlédnutím k jejich možné nejistotě nejvíce přibližuje modelace DEGAS ve sledovaných vzdálenostech 25, 55 a 100 m. Tento výsledek se ale neshoduje s výsledky komparativních modelací dopadů vybraných chemických havárií, kdy modul DEGAS v oblasti blízkého pole udával extrémně vysoké hodnoty. Rozdílnost lze sledovat především v charakteristice a typu havárie, kdy nejlepších výsledků dosahoval modul DEGAS u relativně malého úniku při provozní havárii. V případě modelace havárie ve městě Festus byla tímto modulem oproti ostatním haváriím vypočtena i nejpodobnější rychlost úniku látky ve srovnání s reálnými podmínkami. Modelace ALOHA 2, jejíž metodický postup byl dále použit pro tvorbu komparativních modelací dopadů chemických havárií, udává v oblasti blízkého pole limitní koncentraci látky, která je výrazně nižší oproti reálným podmínkám.

Na prezentovaných výsledcích lze sledovat, že oba použité přístupy s použitím modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx a modelu Heavy Gas nástroje ALOHA částečně selhávají ve výpočtu koncentrace látky v bezprostřední blízkosti zdroje úniku, ale v dalších sledovaných oblastech uvádějí relativně kvalitní výsledky. Jedná

se o charakteristický nedostatek, který je v rámci různých matematických modelů výpočtu šíření těžkých plynů v prostředí běžný a udávané výsledky v oblasti blízkého pole bývají podhodnoceny. Obdobně tomu je i v případě matematického modelu SLAB, který byl použit pro tvorbu modulu DEGAS [60]. Anomálií jsou v tomto ohledu výsledky modelací modulu DEGAS, které v některých případech naopak uvádějí extrémně vysokou koncentraci látky v blízkém poli.

Obdobné experimentální šetření projektu DEGAS bylo realizováno také v USA. Konkrétně se jednalo o dva na sebe navazující projekty pod názvem Jack Rabbit I a II (dále jen JR), na jejichž realizaci se podílela Armáda Spojených států amerických, univerzita Utah Valley a další subjekty. První šetření bylo uskutečněno v roce 2010 a druhé v letech 2015 a 2016. Na období 2022 až 2025 je připravována realizace projektu JR III. Podstatou realizovaných experimentů bylo vypuštění nebezpečné chemické látky z různých typů skladovacích zařízení a za různých podmínek s následným měřením koncentrace látky v prostředí. Prvotní experimenty byly realizovány pod záštitou Správy bezpečnosti dopravy Ministerstva vnitřní bezpečnosti USA. Jejich účelem bylo zjištění zranitelnosti aglomerací a obytných oblastí v případě havárie cisterny převážející nebezpečné látky. Rovněž měly z metodického hlediska ověřit reálnost provedení experimentů daného rozsahu s vypuštěním značného objemu látky a ověřit možnosti její monitorace a detekce v prostředí. Konkrétně byl testován únik chloru a amoniaku o objemu 1 a 2 tuny. Při druhém experimentálním šetření byly testovány různé úniky chloru o objemu 4,5 až 18 tun. Jeho cílem byla analýza úniku stlačeného chloru ze zařízení a jeho následné disperze v atmosféře. Dále vytvoření podnětů pro aktualizaci bezpečnostních standardů a postupů adekvátní reakce záchranných složek v oblasti ochrany obyvatelstva a taktické i operační úrovně řešení chemické havárie s únikem chloru. Cíle a metody plánovaného třetího experimentálního šetření budou podobné druhému se zaměřením na únik amoniaku velkého rozsahu [118, 119, 120].

Experimentální šetření projektu DEGAS bylo po metodické stránce částečně inspirováno experimenty JR I. Námět obou projektů vycházel z totožného poznatku o nebezpečí zejména mobilních zdrojů ohrožení. Samotné provedení a účel experimentů byl ale odlišný. Při obou experimentech byla vypuštěna chemická látka do prostředí a zkoumána charakteristika vytvořeného oblaku těžkého plynu i jeho disperze v atmosféře. Samotný únik byl v obou případech shodně měřen sérií detekčních přístrojů.

Odlišností je charakteristika a směřování úniku, kdy se při experimentech JR I jednalo o vertikální únik směřovaný směrem k zemi a zdroj úniku byl lokalizován ve dvoumetrové prohlubni o průměru 50 m. Při experimentech projektu DEGAS byly simulovány podmínky havárie cisterny s únikem nebezpečné látky v horizontální ose na rovné ploše tvořené betonovou letištní ranvejí. Tento experiment se více přibližoval sérii experimentů projektu JR II. Oproti projektu DEGAS byly experimenty JR I a II blíže zaměřeny na masivní a rychlý únik celého objemu cisterny trvajícím řádově v desítkách vteřin až jednotkách minut. Při hlavním experimentu projektu DEGAS byl simulován sice masivní únik, ale skrze relativně malý otvor, který trval 16 minut. Při komparaci experimentů projektu DEGAS a JR I je taktéž rozdílný rozsah samotného šetření. V obou případech byly iniciálně provedeny pilotní či metodické experimenty, které byly následovány hlavními testy s jejich záznamem a měřením. V případě projektu DEGAS bylo realizováno pouze po jednom z uvedených typů testu. V případě JR I byly realizovány dva metodické experimenty a osm hlavních testů při použití různých chemických látek a variabilního objemu chemického zásobníku [119]. Takový postup by v případě projektu DEGAS vyžadoval nepoměrně větší finanční náklady. Provedení jednoho hlavního experimentu bylo rovněž pro účely projektu DEGAS dostačující.

Dalším zásadním rozdílem byla použitá chemická látka pro simulovaný únik. Při obou experimentálních šetřeních JR byl použit chlor a při prvním také amoniak. Jelikož se jedná o vysoce nebezpečné a toxické látky, byly experimenty realizovány ve výcvikovém prostoru U.S. Army Dugway Proving Ground v poušti ve státě Utah, která nabízí rozsáhlé a prázdné prostranství, jež je pro tyto účely ideální. Při experimentech projektu DEGAS bylo nezbytné pracovat s alternativní látkou, oxidem uhličitým, který má požadované vlastnosti pro tvorbu těžkého plynu, ale jeho toxicita je výrazně nižší. Použití chloru by při experimentech takového rozsahu bylo v podmínkách ČR z bezpečnostního i právního hlediska nereálné. Tato látka také přináší nebezpečí poškození kovových částí detekčních přístrojů z důvodu oxidace při kontaktu s nimi, které bylo sledováno při experimentech JR. Rozdíl byl také v rozsahu samotných experimentů a jejich záznamu, kdy v případě experimentů JR byl pro experimentální účely vyčleněn podstatně rozsáhlejší polygon než v případě projektu DEGAS. Pro experimenty JR I bylo použito 120 detekčních přístrojů různého typu k jejich záznamu, které byly rozmístěny v obloucích v rozmezí 50 až 2 500 m od zdroje úniku. Celkově byla pro tento experiment vytyčena série zón až do uvedené maximální

vzdálenosti. Hlavní měření probíhala ve vzdálenostech 50 až 500 m. V rámci projektu DEGAS probíhal záznam pouze v oblasti blízkého pole do 100 m od zdroje úniku a vzhledem k charakteristice simulovaného úniku byly detektory rozmístěny ve stromové formaci. Žádný z uvedených experimentů ale nesimuloval únik celého objemu velkokapacitní přepravní cisterny, který může být v případě železniční cisterny v rozmezí 50 až 100 tun látky. Závažnost dopadů takové události lze sledovat na příkladu chemické havárie ve městě Graniteville [119, 121, 122].

Při experimentech JR I byla sledována perzistence chloru v prostředí, která byla dle typu experimentu a panujících meteorologických podmínek patrná v rozmezí 30 až 60 minut. Ve výzkumné zprávě je dále deklarováno, že při úniku může být hustota unikajícího chloru až 20krát vyšší než hustota vzduchu [119, 122]. Výskyt obdobného jevu byl uveden ve vyšetřovací zprávě havárie ve městě Graniteville. Při experimentech projektu DEGAS nebyl ale pozorován ve významné míře, jelikož se při nich jednalo o horizontální a značně dynamický únik. Použitý stopovač je v prostředí rovněž značně méně perzistentní než chlor. Podstatný je však uvedený časový údaj perzistence látky v prostředí, který potvrzuje navržené doporučení pro využití korespondujících expozičních dob hodnotících koncentrací.

Při experimentech JR I dále použil výzkumný tým jako jednu z analytických metod modelaci jednotlivých testů pomocí matematického modelu SLAB. Výsledek komparace modelace s naměřenými hodnotami při experimentu ukazuje, že v oblasti blízkého pole tento model mírně nadhodnocuje predikovanou koncentraci látky v prostředí. V oblasti střední vzdálenosti a vzdáleného pole jsou vypočtené hodnoty buď mírně nadhodnoceny, nebo se s měřenými hodnotami shodují. Větší oblast vzdáleného pole nebyla modelována, jelikož v ní již nebyly rozmístěny detekční přístroje. Míra této nepřesnosti nebyla jako jeden z výstupů projektu stanovena, jelikož se zde projeví nedostatky měření použitých detekčních přístrojů. V rámci výstupů experimentálního šetření JR I byly rovněž sledovány a potvrzeny obecné nedostatky matematických modelů popisujících šíření a disperzi těžkých plynů v atmosféře, konkrétně vliv suché a mokré depozice látky, její reaktivity s vlhkostí v ovzduší, proměnné meteorologické podmínky, členitost okolního terénu a zachytávání látky okolní vegetací [119]. Depozice látky při úniku a její reaktivnost s vlhkostí v ovzduší je jedním z jevů, který je matematickými modely úniku a šíření těžkých plynů v prostředí řešen jen částečně ve formě koeficientu, který

na základě zadané hodnoty omezuje šíření látky. Reaktivnost látky a možná tvorba chemických produktů už ale standardně řešena není.

Míra nepřesnosti modelací byla blíže adresována v rámci projektu DEGAS, kdy bylo při tvorbě stejnojmenného modulu, založeného na matematickém modelu SLAB, využito doplňujících procesů s cílem výsledky modelací zpřesnit. Pro doplňující experimentální šetření by bylo možné se zaměřit na fyzické měření koncentrace chemické látky v oblasti vzdáleného pole a hodnoty komparovat s modelací vytvořenou prostřednictvím modulu DEGAS ke zjištění celkové míry přesnosti a validity výsledků. Na základě komparace výsledků modelací prostřednictvím tohoto modulu s dopady reálných chemických havárií, které jsou prezentovány v této práci, lze sledovat relativně kvalitní výsledky v blízkém poli a střední vzdálenosti. Údaje o haváriích ale neposkytují dostatečné informace pro bližší a směrodatnou komparaci v oblasti vzdáleného pole.

Experimentální šetření JR II přímo navazovalo na předešlý projekt realizací dalších experimentů většího rozsahu zaměřených na únik chloru za různých podmínek. Samotné experimenty probíhaly ve dvou sériích. V první sérii v roce 2015 bylo realizováno pět experimentů simulujících únik chloru o objemu 4,5 až 8,2 tuny v urbanistické oblasti. Při všech experimentech byla výpusť látky orientována vertikálně směrem k zemskému povrchu ve výšce 1 m na zemi. Pro účely vytvoření vhodného polygonu, který simuloval zastavěnou oblast malého rozsahu, bylo použito 80 lodních kontejnerů různé velikosti, 2 obytné přívěsy a 10 vozidel, které byly v řadách rozestavěny kolem zdroje úniku. Experimenty byly zaznamenávány s využitím téměř 500 detekčních přístrojů různého typu i detekčních principů a audiovizuálních záznamových zařízení. Detekční přístroje byly rozmístěny v blízkosti zdroje úniku a poté v řadách kopírujících výseč kružnice až do vzdálenosti 11 km od zdroje úniku. Některé detekční přístroje byly rovněž umístěny v objektech a vozidlech pro studium úrovně průniku látky do jejich vnitřního prostředí. Součástí experimentů bylo i studium reakce unikajícího chloru s různými materiály, jejichž vzorky byly umístěny v blízkosti zdroje úniku. Při druhé sérii v roce 2016 byly realizovány čtyři experimenty simulující směrově různě orientovaný únik látky o objemu 8,4 až 18 tun s rozdílností ve vertikální ose. Při těchto experimentech již nebylo využito simulované zastavěné oblasti, ale v zóně úniku bylo umístěno pouze po dvou kontejnerech a vozidlech. Tyto experimenty měly sloužit primárně k záznamu charakteristiky vytvořeného oblaku těžkého plynu, jeho tvaru, délce, šířce a způsobu

šíření v prostředí v závislosti na meteorologických a terénních podmínkách, včetně měření koncentrace látky v jednotlivých sledovaných oblastech. Součástí vyhodnocení experimentů byla jejich modelace a komparace výsledků s modely DRIFT, PHAST a v oblasti blízkého pole s modelem CFD v neupravené verzi [120, 121]. Celkově se jednalo o komplexní experimentální šetření, které je svým rozsahem ojedinělé a přináší unikátní realistický pohled na charakteristiku tvorby, šíření a disperze těžkého plynu v atmosféře.

Při měřeních se výzkumný tým v rámci uvedeného experimentálního šetření shodně s projekty JR I a DEGAS potýkal s nedostatky a limity detekčních přístrojů, které mohly chybně zaznamenat maximální koncentrace z důvodu saturace čidel. Variabilita v detekovaných hodnotách byla u experimentů uvedeného rozsahu dána také faktem, že z důvodu dynamického šíření oblaku těžkého plynu v prostředí mohl některé přístroje v oblasti vzdáleného pole minout. V rámci projektu DEGAS bylo sledováno, že vytvořený oblak těžkého plynu je tvořen shluky menších oblak o variabilní koncentraci, které podléhají turbulentnímu proudění vzduchu, což uvedený jev částečně vysvětluje. Výsledky observace charakteristiky tvorby oblaku těžkého plynu, jeho dynamiky šíření a následné disperze v atmosféře, byly v případě experimentů JR a DEGAS obdobné [119, 120].

Obecně je únik stlačeného, zkapalněného plynu značně dynamický jev, který je významně ovlivňován řadou faktorů. Mezi faktory, které ovlivňují rychlost úniku látky ze zařízení, řadíme z fyzikálního hlediska zejména tlak látky při jejím skladování. Dále je pro dynamiku úniku látky a tvorbu oblaku těžkého plynu podstatná velikost únikového otvoru, její lokalizace a hladina kapaliny v zásobníku. Při úniku poté dochází se snižujícím se tlakem látky v zařízení k jejímu ochlazení, které může být až pod bod varu dané látky. Následně se mění charakteristika úniku a v okolí zásobníku se může vytvořit kaluž rychle se odpařující kapalně fáze. Dynamika a rychlost úniku látky se v průběhu času z důvodu tohoto jevu zpomalují. V zásobníku může následně v závislosti na lokalizaci únikového otvoru zůstat část kapalně fáze látky s pomalým odparem. Tento jev byl popisován při havárii ve městě Graniteville a rovněž byl sledován při jednotlivých experimentech JR II, kdy bylo stanoveno, že reziduální objem látky v zásobníku může být v závislosti na lokalizaci únikového otvoru v rozmezí 10 až 70 %. Při experimentech JR II bylo dále zjištěno, že meteorologické podmínky mají velmi

významný vliv na šíření látky v prostoru, zejména v oblasti vzdáleného pole. Při rozdílu rychlosti větru o 1,9 m/s byla ve vzdálenosti 11 km od zdroje úniku v případě nižší rychlosti detekována koncentrace látky 0 až 4 ppm a v případě vyšší rychlosti 20 ppm. Dále bylo zjištěno, že pokles koncentrace látky o relativně malé hodnotě, několik desítek ppm, je v oblasti vzdáleného pole velmi pozvolný. Přes vzdálenost 6 km byl v případě jednoho z experimentů detekován pokles koncentrace látky pouze o 4 ppm [82, 83, 120].

Modelace úniku a šíření těžkých plynů v podmínkách vybraných chemických havárií

Pro účely komparativních modelací dopadů vybraných chemických havárií byl v softwarovém nástroji ALOHA zvolen postup se zadáním definované rychlosti úniku látky a doby jejího trvání. Alternativní postup při zadání parametrů chemického zásobníku nebyl zvolen ze dvou důvodů. Prvním je závažnost rozdílnosti výsledků při komparativní modelaci experimentálního šetření projektu DEGAS, kdy výsledky tohoto postupu byly mimo oblast blízkého pole nejvíce rozdílné oproti ostatním modelacím i observacím při experimentu. Druhým důvodem je nízká úroveň univerzálnosti, kdy pro využití uvedeného postupu je možné modelovat únik pouze přímo ze zařízení. V případě prvních dvou analyzovaných havárií lze tento postup aplikovat, ale v případě třetí modelace havárie ve městě Tavaux nikoliv, jelikož zde byl zdrojem úniku 14 m vysoký komín. Tento postup v případě modelace experimentu DEGAS také vykazoval největší chybovost ve výpočtu rychlosti úniku látky a jejím trvání. Vypočtené hodnoty koncentrací mimo oblast blízkého pole tomuto jevu odpovídají. Při aplikaci postupu modelace se zadáním parametrů chemického zásobníku pro havárii ve městě Festus udává výsledek shodnou chybu ve výsledných výpočtech. Konkrétně udává rychlost úniku 5 kg/s, což je více než dvojnásobně oproti reálným podmínkám. Dále udává vypočtené vzdálenosti koncentrace AEGL 2 a 3 do dvojnásobné vzdálenosti oproti výsledku zvoleného postupu modelace v nástroji ALOHA. Uvedený postup by mohl být přínosný pouze pro výpočet předpokládané koncentrace v oblasti blízkého pole, kde dle modelace za podmínek experimentu DEGAS udává realistické hodnoty.

Pokud bychom v softwarovém nástroji ALOHA použili postup modelace ze zásobníku v případě analyzované havárie ve městě Graniteville, byly by udávané výsledky výpočtu jednotlivých vzdáleností nižší oproti zvolenému postupu. V oblasti blízkého pole udávají výsledky tohoto alternativního postupu realistickou koncentraci látky hraniční s hodnotou

1 milion ppm. Takto vysoká koncentrace, odpovídající 100 % nasycení prostoru danou látkou, není v prostředí reálné atmosféry fakticky možná, neboť se vždy v daném prostoru budou vyskytovat také molekuly vzduchu. Dalším nedostatkem je opět vypočtená rychlost úniku a doba jeho trvání. Dle uvedeného postupu je vypočtená rychlost úniku 943 kg/s, což je více než poloviční oproti reálné hodnotě 1 602 kg/s. Doba trvání úniku je vypočtena na 44 min a je velmi výrazně rozdílná oproti reálné hodnotě, která byla 34 s. Vystává zde otázka, jakým způsobem byla v případě této havárie doba trvání úniku stanovena, jelikož uvedený reálný čas mapuje pouze primární únik po poškození pláště cisterny. Po této době je ve vyšetřovací zprávě události uvedeno, že se v okolí úniku a v cisterně samotné vytvořila kaluž kapalného chloru, která se následně pozvolna odpařovala po dobu několika hodin [103]. Tuto dynamiku a charakteristiku úniku ale modelace nedokáže plnohodnotně zohlednit a ve své podstatě kombinovat dva typy úniku v jedné modelaci.

V případě obou možných modelací havárie ve městě Festus prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA se projevuje omezení výpočtu v době trvání úniku maximálně 60 min. Druhým omezením, které je relevantní především při modelaci havárie ve městě Graniteville, je maximální vzdálenost výpočtu do 10 km. Toto omezení vychází z metodiky testování matematického modelu HEDEGAS, které probíhalo v 50. a 60. letech minulého století. Při testech byla měřena koncentrace látky do 1 km od zdroje úniku, jelikož pouze ve velmi malém procentu případů byla při chemických haváriích měřena koncentrace látky až do vzdálenosti 10 km. Nad tuto vzdálenost je také vliv meteorologických a terénních podmínek na unikající látku a vytvořený oblak těžkého plynu tak významný, že dle použitého matematického modelu nelze jeho šíření spolehlivě predikovat. Obecně byly při tvorbě komparativních modelací předpokládány přesnější výsledky softwarového nástroje ALOHA v případě havárií ve městech Festus a Graniteville, jelikož matematický model Heavy Gas používaný tímto nástrojem vychází z modelu HEDEGAS, který byl primárně vyvinut k výpočtu a predikci šíření chloru v prostředí [66].

Modul DEGAS vykazoval při jednotlivých modelacích nedostatky ve výpočtu rychlosti úniku látky ze zařízení, konkrétně udával ve všech případech nižší rychlost oproti reálným podmínkám. Při modelaci havárie ve městě Graniteville udával rychlost úniku téměř 10krát nižší. Pokud bychom při této modelaci změnil nastavený přetlak

v zařízení, aby rychlost úniku odpovídala reálným podmínkám, bylo by nezbytné nastavit hodnotu 6 375 kPa. Poté by byla koncentrace IDHL vypočtena do vzdálenosti téměř 32 km a ve vzdálenosti 1 000 m by byla koncentrace 2 140 ppm. Oproti prezentovaným výsledkům jsou tyto hodnoty několikanásobně vyšší, ale udávaná hodnota koncentrace v 1 000 m je stále podstatně nižší, než uvádí výpočet nástroje ALOHA. V případě havárie ve městě Festus by bylo nezbytné nastavit přetlak látky v zařízení na hodnotu 1 683 kPa. Koncentrace IDLH by poté byla udávána do vzdálenosti 1 550 m a ve vzdálenosti 1 000 m by byla koncentrace 17 ppm. Tyto hodnoty jsou velmi podobné původním výsledkům prezentovaných modelací vytvořených prostřednictvím obou použitých softwarových nástrojů. Dle prezentovaných výsledků je nezbytné brát výpočet rychlosti úniku látky modulem DEGAS pouze jako orientační. Matematické modely v této oblasti obecně chybují a plně nereflektují možnou proměnlivost dynamiky úniku látky ze zařízení. Tento jev rovněž komplikuje přesné určení rychlosti úniku látky a pro účely modelací je vhodné pracovat především s průměrnými hodnotami, které lze v případě reálné chemické havárie následně dopočítat. Hodnoty vstupních parametrů by však měly co nejvíce odpovídat reálným podmínkám, aby bylo dosaženo přesných a věrohodných výsledků. V této oblasti je v modulu DEGAS prostor pro zlepšení k dosažení ucelených a kvalitnějších výsledků ve vypočtených parametrech. I přes udávané nižší rychlosti úniku v jednotlivých modelacích odpovídají při komparaci výstupů zvolených softwarových nástrojů výsledky modulu DEGAS nejvíce reálným podmínkám.

Výsledky uvedených komparativních modelací mohly být mírně ovlivněny nízkou úrovní dostupnosti přesných meteorologických podmínek v místě analyzovaných havárií. Uvedené meteorologické údaje byly v prvních dvou případech převzaty z měřicích stanic, které se nacházejí několik desítek kilometrů od místa události. Přesné meteorologické podmínky mohly být v místě havárií mírně odlišné. Nicméně při studiu výzkumných zpráv bylo zjištěno, že uvedené údaje jsou relativně podobné reálným podmínkám, ale zprávy neobsahovaly záznam o veškerých nezbytných parametrech pro tvorbu modelací. V oblasti blízkého pole tento typ údajů nemá až tak závažný význam, ale v oblasti vzdáleného pole mají meteorologické podmínky výrazný vliv na šíření látky v prostoru, jak potvrzují výstupy experimentů JR. V této oblasti mohou být rozdíly ve výsledcích modelací řádově stovky metrů až jednotky kilometrů. Vzhledem k obecně sledované validitě výsledků softwarových modelací šíření a rozptylu těžkého plynu v atmosféře lze označit možnou odchylku v meteorologických podmínkách

za přijatelnou, která nemá zásadní vliv na prezentované výsledky. Vyhodnocení stanovených hypotéz není tímto faktorem zásadně ovlivněno.

Na uvedených výsledcích lze sledovat nižší úroveň přesnosti výsledků při modelaci masivního a velmi rychlého úniku látky, který lze označit za nejhorší možnou havárii, jako v případě havárie ve městě Graniteville. Při modelaci tohoto typu havárie jsou výsledky modelací méně přesné než při menších, kontinuálních únicích, které lze označit za provozní havárie. Při vyhodnocení modelace nejhorší možné havárie je zapotřebí vzít v potaz i časovou osu úniku a dobu přítomnosti látky o vysoké koncentraci v prostředí, než dojde k její disperzi. Potencionálně zasažená oblast může být značně rozsáhlá, ale maximální expoziční doba může být pouze v řádu minut. Nicméně to neznamená, že nedojde ke vzniku zdravotních následků u osob exponovaných unikající látky. Problém rovněž představují prostory a oblasti, kde nedochází k rychlé disperzi látky, například uzavřené prostory či níže položené oblasti, kde se může látka kumulovat a setrvat podstatně delší dobu. Při zasažení nebezpečnou látkou s dusivými vlastnostmi o vysoké koncentraci, jako je například chlor, dochází k udušení během několika minut. Lze tudíž při krátce trvajícím masivním úniku nebezpečné látky předpokládat závažné zdravotní následky i u osob, které jsou exponovány pouze po krátkou dobu. Budovy mají na druhou stranu svou konstrukční podstatou určitou ochrannou funkci, kterou lze využít pro ukrytí osob. Plynné látky mají obecně tendenci pronikat do budov pomalu. Míra ochrany blíže závisí na kvalitě utěsnění prostor a míře větrání či přítomnosti otevřených větracích nebo vstupních prvků, které mohou tuto charakteristiku výrazně snížit.

Tématice softwarové modelace dopadů chemických havárií se ve své publikaci rovněž věnuje autor Hanna et al. [107], ve které použil šest softwarových nástrojů, potažmo matematických modelů, k modelaci tří vybraných chemických havárií spojených s únikem chloru. Jednalo se o nástroje/modely TRACE, PHAST, SCIPUFF, SLAB, HG-SYSTEM a ALOHA. Všechny uvedené modely jsou určeny k modelaci šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře. Modelace dopadů dvou shodných havárií byla taktéž předmětem této práce, konkrétně havárie ve městech Festus a Graniteville. Hanna ve své publikaci sledoval vypočtenou koncentraci látky ve vzdálenostech 100 m až 25 km s relevantními odstupy. Jelikož se jedná o podobný charakter výzkumu s touto prací, lze dosažené výsledky v určité míře vzájemně komparovat. Pro tyto účely byl zvolen výpočet koncentrace látky ve vzdálenosti 100, 200, 500 m a 1 km. Jedná se o vzdálenosti,

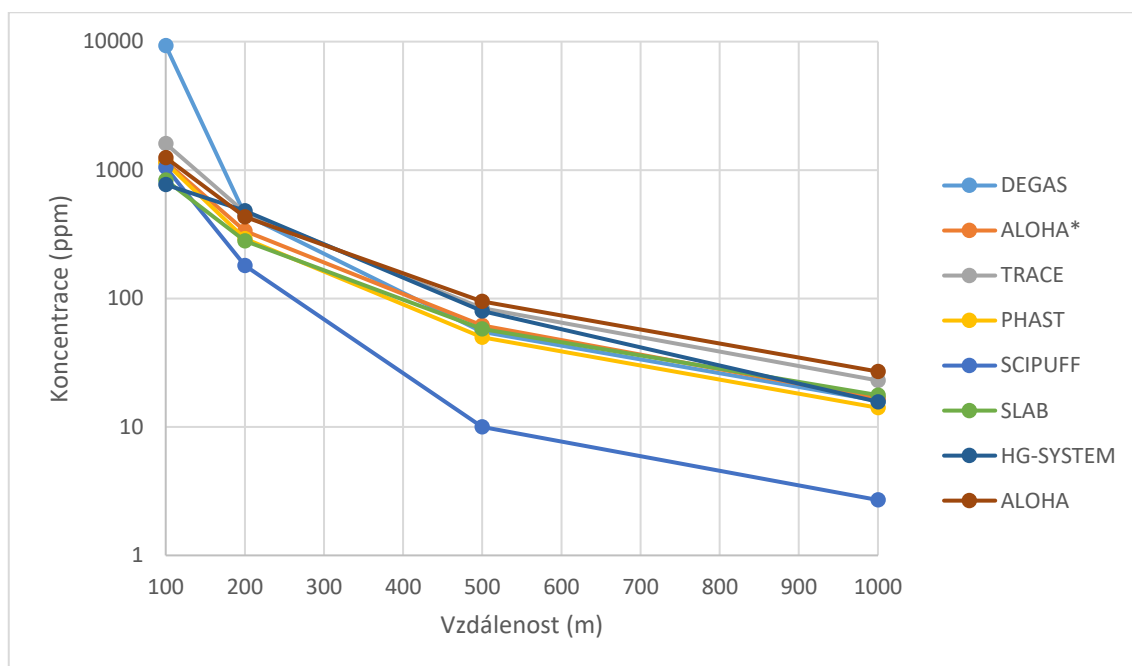
kteře byly shodně použity k hodnocení výsledků modelací. Ve vzdálenostech nad 10 km autor udává již nulové nebo velmi nízké koncentrace a tato vzdálenost rovněž není zcela relevantní z důvodu omezení maximální vzdálenosti výpočtu softwarového nástroje ALOHA a popisované nízké přesnosti výsledků modelací nad tuto vzdálenost.

Dále se autor zaměřoval na výpočet vzdálenosti při koncentraci látky v prostoru 2 000, 400 a 20 ppm. Uvedený postup hodnocení a evaluace výsledků se v rámci mezi metodicky shoduje s postupy zvolenými v této práci. Následně dle možností jednotlivých modelů komparoval vypočtenou šířku a délku oblaku těžkého plynu, což ale modul DEGAS ani nástroj ALOHA neumožňuje. Po metodické stránce zvolil autor při tvorbě modelací obdobný postup a vycházel primárně z vyšetřovacích zpráv jednotlivých havárií. Jako problém shodně uvádí získávání meteorologických hodnot, které byly v blízkosti havárií minimálně dostupné. Vstupní parametry modelací se tedy v některých ohledech mírně liší s hodnotami použitými v této práci, ale ne významně. Každý model rovněž vyžaduje v některých bodech rozdílné vstupní údaje a k modelacím přistupuje odlišně. Hanna ve své publikaci použil pro všechny analyzované modely charakteristiku dvoufázového úniku a v případě nástroje ALOHA použil postup modelace se zadáním konstantní rychlosti úniku po stanovenou dobu jeho trvání [107]. Výsledky jednotlivých modelací dopadů havárie ve městě Festus jsou uvedeny v tabulce 14 a výpočet koncentrace v určené vzdálenosti na obrázku 14. Pro modelaci dopadů havárie ve městě Graniteville jsou tyto výsledky uvedeny v tabulce 15 a na obrázku 15. Modelace ALOHA* udává výsledky, které byly vytvořeny v této práci.

Tabulka 14: Komparativní výsledky modelací havárie ve městě Festus [107]

| Vzd. | DEGAS | ALOHA* | TRACE | PHAST | SCIPUFF | SLAB | HG-SYSTEM | ALOHA |
|-------|-------|--------|-------|-------|---------|------|-----------|-------|
| m | ppm | ppm | ppm | ppm | ppm | ppm | ppm | ppm |
| 100 | 9 315 | 1 160 | 1 605 | 1 137 | 1 050 | 836 | 770 | 1 250 |
| 200 | 449 | 336 | 468 | 293 | 180 | 280 | 481 | 433 |
| 500 | 55 | 61,7 | 84 | 50 | 10 | 58 | 80 | 95 |
| 1 000 | 16 | 16,7 | 23 | 14,1 | 2,7 | 17,7 | 15,7 | 27 |

| Kon. | DEGAS | ALOHA* | TRACE | PHAST | SCIPUFF | SLAB | HG-SYSTEM | ALOHA |
|-------|-------|--------|-------|-------|---------|------|-----------|-------|
| ppm | m | m | m | m | m | m | m | m |
| 2 000 | 135 | 69 | 86 | 63 | 70 | x | x | x |
| 400 | 205 | 182 | 220 | 168 | 170 | 170 | 300 | 250 |
| 20 | 900 | 909 | 1 060 | 837 | 405 | 900 | 900 | 1 300 |



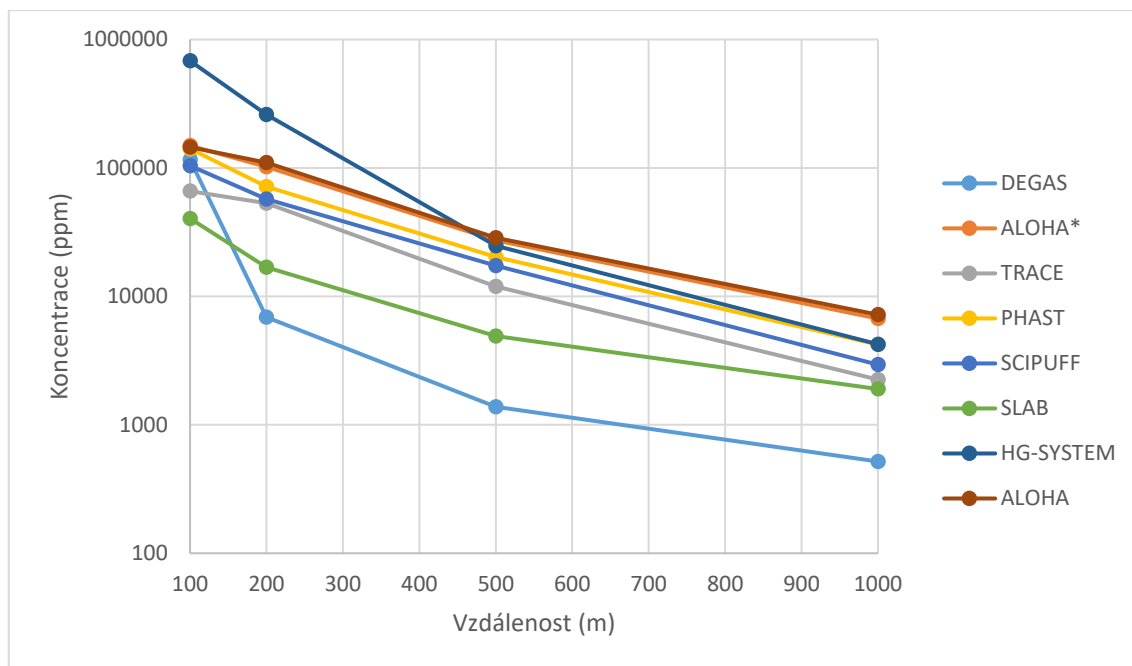
Obrázek 14: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru prostřednictvím série modelů pro havárii ve městě Festus [107]

Při porovnání uvedených výsledků lze sledovat dvě anomálie ve vypočtených koncentracích v určených vzdálenostech. Jedná se o modul DEGAS, který ve vzdálenosti 100 m od zdroje úniku uvádí oproti ostatním modelům výrazně vyšší koncentraci látky. Dále model SCIPUFF, který predikuje nejvýraznější pokles koncentrace látky v prostoru a od vzdálenosti 200 m udává nejnižší hodnoty. Neshoda modulu DEGAS se shoduje se závěry komparativních modelací této práce, kdy uvedený modul udává v oblasti blízkého pole a bezprostřední vzdálenosti od zdroje úniku nadhodnocené výsledky. Jedná se ale o způsob stanovení následného poklesu koncentrace látky v prostoru a v ostatních sledovaných vzdálenostech jsou udávané hodnoty v relativní shodě s ostatními modely. Otázkou zde ale je, jakým způsobem stanovují ostatní modely koncentraci látky v oblasti blízkého pole a zdali nejsou udávané hodnoty podhodnoceny. Obecně se jedná o kritický bod modelací. Dle analýzy této havárie se výsledek modulu DEGAS v oblasti okolo

100 m shoduje s reálnými podmínkami. Nejpodobnějších výsledků ve výpočtu koncentrace v určené vzdálenosti s rozdílností pod 10 % dosahuje modul DEGAS s modely TRACE, HG-SYSTEM a ALOHA. Při výpočtu vzdálenosti dle určené koncentrace se 5 modelů, včetně modulu DEGAS, relativně shoduje v určení vzdálenosti okolo 900 m pro koncentraci 20 ppm s rozdílností pod 10 %. Pro koncentraci 400 ppm se modul DEGAS blíže shoduje jen s modely ALOHA* a TRACE. Pro koncentraci 2 000 ppm udává modul DEGAS největší vzdálenost oproti ostatním modelům, které předpokládají překročení uvedené koncentrace. Celkově lze konstatovat, že při modelaci uvedené havárie jsou výsledky modulu DEGAS relativně podobné výsledkům ostatních modelů mimo oblast blízkého pole a vykazují největší podobnost modelu TRACE.

Tabulka 15: Komparativní výsledky modelací havárie ve městě Graniteville [107]

| Vzd. | DEGAS | ALOHA* | TRACE | PHAST | SCIPUFF | SLAB | HG-SYSTEM | ALOHA |
|-------------|--------------|---------------|--------------|--------------|----------------|-------------|------------------|--------------|
| m | ppm | ppm | ppm | ppm | ppm | ppm | ppm | ppm |
| 100 | 115 600 | 149 000 | 65 971 | 141 000 | 104 000 | 40 400 | 681 000 | 145 000 |
| 200 | 6 900 | 102 000 | 53 153 | 71 500 | 57 300 | 16 900 | 261 000 | 110 000 |
| 500 | 1 380 | 27 300 | 11 960 | 20 300 | 17 300 | 4 900 | 24 800 | 28 500 |
| 1 000 | 518 | 6 720 | 2 250 | 4 220 | 2 940 | 1 900 | 4 240 | 7 200 |
| Kon. | DEGAS | ALOHA* | TRACE | PHAST | SCIPUFF | SLAB | HG-SYSTEM | ALOHA |
| ppm | km | km | km | km | km | km | km | km |
| 2 000 | 0,5 | 1,7 | 0,66 | 1,37 | 1,3 | 1 | 1,5 | 1,8 |
| 400 | 1,2 | 3,2 | 1,8 | 2,75 | 1,8 | 3,5 | 4 | 4 |
| 20 | 8 | 9,7 | 20,1 | 16,4 | 9,4 | 18 | >10 | >10 |



Obrázek 15: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru prostřednictvím série modelů pro havárii ve městě Graniteville [107]

Na základě komparace uvedených výsledků modelace havárie ve městě Graniteville lze konstatovat, že se výsledky jednotlivých modelů vzájemně rozcházejí. Ve vzdálenosti 100 m od zdroje úniku se výsledky modulu DEGAS vzdáleně podobají výsledkům modelů PHAST, SCIPUFF a oběma modelacím nástroje ALOHA. Rozdílnost výsledků pod 10 % je pouze s modelem SCIPUFF při výpočtu z hodnoty udávané modulem DEGAS. V ostatních vzdálenostech udává modul DEGAS největší pokles koncentrace látky a celkově nejnižší hodnoty. Při komparaci vypočtené vzdálenosti dle určené koncentrace se výsledky opět výrazně rozcházejí. Modul DEGAS udává nejmenší vypočtené vzdálenosti pro jednotlivé koncentrace. Pro koncentrace 400 ppm a 20 ppm se ale přibližují výsledkům ostatních modelů, nejbližší modelu SCIPUFF. Udávané výsledky obou modelacím nástroje ALOHA se při této havárii jeví v oblasti vzdáleného pole jako nejvíce nadhodnocené, což se shoduje se závěry analýzy komparativních modelací této práce. V případě modelací obou havárií se v oblasti blízkého pole jeví výsledky modelu SLAB jako podhodnocené, což koresponduje s obecným tvrzením o tomto modelu, ale v ostatních vzdálenostech uvádí uspokojivé výsledky.

Na základě prezentovaných komparací nelze přesněji určit, který model poskytuje nejpřesnější výsledky modelace šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře. Ze své podstaty jsou modely rozdílné a tento jev lze sledovat i na modulu DEGAS v komparaci s výsledky modelu SLAB, ze kterého vychází. Pro bližší určení přesnosti by bylo

nezbytné v případě uvedených havárií disponovat hodnotami fyzických měření v čase a prostoru z místa události. V případě modelace dopadů jiných havárií mohou být výsledky modelací proměnné a velmi záleží na konkrétních podmínkách a vstupních hodnotách, včetně jejich kvality a přesnosti, které jsou do modelací zaneseny. Ne všechny modely jsou také univerzálně vhodné pro modelaci rozdílných typů havárií. Jednou ze slabin modelačních softwarových nástrojů a jejich matematických modelů obecně je výpočet koncentrace látky v oblasti blízkého pole a její distribuce v prostředí. Z fyzikálního hlediska se jedná o poměrně složitý proces, který je i z důvodu omezeného detekčního limitu soudobých detekčních přístrojů pro reálné nebezpečné látky, kterými jsou zejména chlor a amoniak, nedostatečně zmapován. Ve většině případů je hodnota koncentrace v této oblasti pouze odhadována a z pohledu modelací lze tedy směřodratně brát v úvahu až výsledky v oblasti střední vzdálenosti. Jedná se ale také o jeden z podnětů vzniku výzkumných projektů a terénních experimentů, kterými jsou například uvedené projekty DEGAS a JR, na jejichž základě jsou matematické modely dále vyvíjeny a jejich výsledky zpřesňovány. Uvedené výsledky potvrzují závěr, že modelace šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře dosahují nejkvalitnějších výsledků pro provozní havárie menšího rozsahu s relativně malým únikem látky do okolního prostředí o nižších rychlostech.

Dle prezentovaných výstupů komparativních modelací dopadů vybraných chemických havárií lze konstatovat, že ani jeden z použitých softwarových nástrojů přesně nepopisuje a nezakresluje charakteristiku úniku látky. Po grafické stránce nástroje TerEx a ALOHA vykreslují oblast šíření těžkého plynu v prostředí, kterou je možné zanezt na mapový podklad. Matematické modely popisující šíření a rozptyl těžkého plynu v atmosféře obvykle počítají tvar vytvořeného oblaku, jeho délku, šířku a výšku. Univerzálně využitelnými údaji pro interpretaci výsledků modelací jsou zejména délka a šířka oblaku, na základě kterých lze predikovat oblast, která může být potenciaálně zasažena nebezpečnou látkou. Obecně je zóna šíření těžkého plynu matematicky charakterizována jako podlouhlý ovál či elipsoidní tvar. Je však nezbytné si uvědomit, že se oblak těžkého plynu nešíří rovně a přesně dle tohoto geometrického obrazce. Z uvedeného pohledu mají vliv na šíření látky v prostoru meteorologické podmínky a charakter okolního terénu, jeho členitost, výskyt překážek apod. Tento fakt blíže potvrzují výstupy experimentů JR II, při kterých byl analyzován tvar vytvořeného oblaku těžkého plynu a způsob jeho šíření v prostředí. Z výstupů je patné, že vytvořený oblak je podlouhlého necharakteristického

tvaru a dle místních podmínek se může ve větších vzdálenostech od zdroje úniku dělit na více samostatných větví toku těžkého plynu. Při jednotlivých experimentech byly sledovány maximálně dvě větve, které mohou variabilně obtékat větší terénní překážky a při dostatečném dosahu se mohou následně opět spojit [121]. Tuto charakteristiku lze ale předpokládat primárně v otevřeném terénu. V případě úniku v zastavěné oblasti bude charakteristika šíření těžkého plynu jiná a bude kopírovat tvar propustí mezi jednotlivými objekty, ohraničené komunikace apod. Z matematického pohledu je tedy obecně elipsovitý tvar pro popis oblaku těžkého plynu možný, ale je nezbytné jej brát pouze jako orientační, především v oblastech se složitým a členitým terénem.

Užitečným údajem při hodnocení a interpretaci výsledků modelací v konkrétních podmínkách je vyobrazení možného grafického charakteru oblaku těžkého plynu a zvýraznění okolních oblastí, do kterých se může variabilně šířit dle aktuálních podmínek. Tuto oblast lze graficky znázornit jako variabilní výseč z kružnice či obdobný tvar, v jehož střední ose bude zanesena elipsa charakterizující šířku a délku oblaku těžkého plynu. Vzhledem k charakteristice šíření daného oblaku při analyzovaných chemických haváriích je rovněž vhodné vykreslovat potenciálně zasaženou oblast i do ostatních směrů, než jakým je stanoveno proudění větru. Modelace v tomto ohledu počítají pouze s difuzním mechanismem šíření těžkého plynu v prostředí, ale dle analyzovaných havárií a možností proměny meteorologických podmínek se látka v určité míře šíří i do ostatních směrů. Pro přesnější vymezení nebezpečné oblasti v blízkosti zdroje úniku by bylo vhodné při vyobrazení výsledků modelací zanést do této oblasti kružnici o variabilním průměru, který bude blíže odhadnut na základě závažnosti úniku a zadaných vstupních parametrech.

Grafické výstupy analyzovaných softwarových nástrojů se vzájemně značně liší. Nástroj TerEx znázorňuje primárně kruhovou oblast vyobrazující oblast o předem definované koncentraci, do které zanáší menší výseč z kružnice s nastavitelným směrem, která symbolizuje hlavní směr šíření oblaku těžkého plynu. Matematický model SLAB, který je využit modulem DEGAS, ale počítá i parametry vytvořeného oblaku těžkého plynu, jež vyobrazuje ve tvaru elipsy. Pro lepší přehlednost a interpretaci výsledků by zde bylo vhodné zakomponovat tento vypočtený tvar do zobrazované směrové výseče. Na druhou stranu nástroj ALOHA používá k vyobrazení výsledků modelací tvar elipsy, který je v některých případech dle zadaných vstupních parametrů, zejména při modelaci

krátce trvajících úniků, doplněn o kružnici variabilního průměru v okolí zdroje úniku. V některých případech rovněž vyobrazuje i směrovou výseč s elipsou ve střední ose symbolizující oblasti, ve kterých se může oblak těžkého plynu potencionálně šířit. Uvedené grafické výstupy ale nejsou zobrazeny při každé modelaci a dle analyzovaných dopadů chemických havárií je vykreslená kružnice v okolí zdroje úniku stanovena v nedostatečném rozsahu.

Z pohledu přehlednosti výstupů modelací obou softwarových nástrojů jsou výsledky prezentovány v textové podobě uvádějící řadu údajů aplikovatelných při zhodnocení závažnosti události a stanovení či plánování odpovídajících opatření ochrany obyvatelstva. Základní rámec výstupů je podobný a oba analyzované nástroje uvádějí zadané vstupní údaje, rychlost úniku látky a vzdálenost dosahu látky dle definovaných hodnotících koncentrací. Nástroj TerEx navíc uvádí doplňující informace pro provedení evakuace obyvatel a chemického průzkumu. Pro širší využití modulu DEGAS by z pohledu variability vstupních údajů bylo vhodné, aby umožňoval výpočet při zadání konkrétní rychlosti úniku látky. Dále by při tvorbě modelací bylo možné do výpočtu kontinuálního úniku zanechat nastavitelný údaj o celkovém objemu látky v zařízení. V současné podobě pracuje při kontinuálním úniku primárně s přetlakem látky v zařízení a dle prezentovaných výsledků jsou vypočtené rychlosti úniku podhodnocovány. Při zadání přesné hodnoty tohoto parametru lze ale očekávat rozdílnost výsledků, jejichž kvalita může být tímto postupem ovlivněna. Oproti nástroji ALOHA modul DEGAS ve svých výsledcích neuvádí údaj o výpočtu celkového uniklého množství látky. Dále je otázkou, jak náročný by byl zásah do použitého matematického modelu a softwarového nástroje samotného k umožnění uvedených funkcionalit.

V oblasti prezentace výpočtu dosahu látky dle konkrétní koncentrace je flexibilnější nástroj ALOHA, který umožňuje vlastní nastavení hodnotících koncentrací nebo výběr přednastavených. Při definování konkrétního bodu v zóně úniku také uvádí graf vývoje koncentrace látky v čase, včetně koncentrace, která může penetrovat do budov. Obecně je časová osa při hodnocení chemických havárií velmi užitečným údajem, na základě kterého lze predikovat dynamiku šíření látky v prostoru a poskytuje přehled o dostupném čase pro provedení adekvátních opatření. Touto funkcionalitu nástroj TerEx bohužel nedisponuje. Na druhou stranu umožňuje zobrazení grafu, který prezentuje vývoj koncentrace látky v prostoru v přímé ose úniku. Samotný graf je přehledně prezentovaný,

ale pro lepší odečítání konkrétních hodnot postrádá funkci nastavení přesné hodnoty na ose x nebo y, pro kterou by byla zobrazena odpovídající hodnota na ose druhé. Tuto funkcionalitu umožňuje pouze v předem definovaných bodech, kterými je ale zobrazená křivka nedostatečně pokryta. Jedním z identifikovaných nedostatků modulu DEGAS je uvádění více než absolutní koncentrace látky v oblasti blízkého pole. Nejedná se ale o funkční problém, nýbrž o postup stanovení a zobrazení úrovně následného poklesu koncentrace látky v závislosti na vzdálenosti od zdroje úniku. Pro lepší přehlednost by bylo vhodné při tvorbě grafu vizuálně limitovat maximální koncentraci na hranici 100 % nebo v grafu tuto hladinu zvýraznit, aby nebyla mylně odečítána, respektive interpretována.

Charakterizace doporučení k využití softwarových modelací úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře v oblasti chemické bezpečnosti a ochrany obyvatelstva

Dle současných možností modelačních softwarových nástrojů a jejich celkové koncepci lze doporučit jejich využití zejména v analytické oblasti, která je primárně zaměřena na analýzu rizik a přípravu bezpečnostní dokumentace různého charakteru, především pro stacionární zdroje ohrožení. Modelace jsou rovněž vhodným doplněním při stanovení zóny havarijního plánování chemických zařízení, které jsou v našich podmínkách v souladu s příslušnými právními předpisy stanovovány pro objekty kategorie B dle zákona č. 224/2015 Sb., o prevenci závažných havárií, ve znění pozdějších předpisů. K optimalizaci těchto zón využívá HZS ČR modelační softwarový nástroj OPTIZON. V této oblasti mohou modelace s využitím dalších softwarových nástrojů sloužit k ověření stanovených zón při sledování dosahu určené koncentrace látky v okolním prostředí zdroje úniku, respektive v okolí chemického zařízení. V tomto případě lze modelovat různé scénáře havárií, provozní i nejhorší možné havárie, z různých zdrojů úniku a za různých podmínek s variacemi ve zdroji úniku a jeho charakteristice, rychlosti úniku látky a meteorologických podmínkách, včetně rozdílnosti v denní době i ročním období. Prezentované výsledky ukazují, že matematické modelace šíření a disperze těžkých plynů v atmosféře jsou vhodné primárně pro modelaci menších, provozních havárií s pomalejší rychlostí úniku látky ze zdroje, kdy dosahují relativně přesných a věrohodných výsledků. Při modelaci nejhorší možné havárie vykazují výsledky řadu nedostatků, ale pro účely orientačního zhodnocení situace a závažnosti chemické havárie jsou dostatečné. V návaznosti na toto zhodnocení mohou výsledky

modelací napomoci při určení vhodných opatření ochrany obyvatelstva a oblastí, ve kterých by měly být primárně realizovány, případně lze stanovit oblasti, ve kterých by měly být realizovány úkony chemického průzkumu.

Výsledky modelace úniku nebezpečných chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů v atmosféře lze blíže doporučit pro implementaci do bezpečnostní dokumentace a analýzy rizik všech objektů skladujících nebezpečné chemické látky a směsi, jejichž plyny a páry vykazují nebezpečné vlastnosti pro životy a zdraví osob, zvířat a životní prostředí, a to bez ohledu na to, zdali mají povinnost zpracování nebo je pro ně zpracovávána bezpečnostní dokumentace. Analyzované softwarové nástroje a jejich zkoumané matematické modely dosahují relativně kvalitních výsledků, které mají podobnost s reálnými chemickými haváriemi a lze je v orientační míře doporučit k tomuto účelu. Přednostně lze doporučit modul DEGAS softwarového nástroje TerEx, který na základě komparace výsledků s modelem Heavy Gas nástroje ALOHA a s dopady vybraných chemických havárií různého charakteru i přes určité v této práci uvedené nedostatky objektivně dosahuje kvalitnějších výsledků při výpočtu šíření a disperze těžkých plynů v atmosféře.

Modelace jsou také vhodným nástrojem pro tvorbu retrospektivních analýz již proběhlých chemických havárií a jejich výsledky je následně možné použít při tvorbě vyšetřovací zprávy dané události. Vhodnost uvedeného doporučení potvrzují analyzované chemické havárie, kdy bylo tohoto postupu využito. Použití modelací lze v určité míře indikovat i pro analýzu potenciálních úniků z mobilních zdrojů ohrožení, ale pouze v omezeném rozsahu, kdy je možné na základě analýzy tras transportu nebezpečných chemických látek a směsí identifikovat rizikové úseky trasy, na kterých by mohlo potenciálně dojít k havárii v důsledku specifických faktorů komunikace nebo lidského faktoru. Případně se lze zaměřit na oblasti, v jejichž okolí se nacházejí významné lokality a objekty z pohledu ochrany obyvatelstva, jako jsou například obytné zóny či sociální, školská nebo zdravotnická zařízení. Z pohledu chemické bezpečnosti nepodléhá v podmínkách ČR transport nebezpečných chemických látek a směsí povinnosti zpracování bezpečnostní dokumentace, která by obsahovala analýzu rizik, ve které by byly modelace aplikovatelné.

Dostupné modelační softwarové nástroje jsou primárně určeny k modelaci úniků chemických látek, směsí a šíření těžkých plynů ve vnějším prostředí. V této oblasti je z pohledu chemické bezpečnosti i koncepce těchto nástrojů největší míra jejich využitelnosti, jelikož umožňují predikci šíření látek v prostředí a analýzu potencionálních dopadů na obyvatelstvo, zvířata a životní prostředí. Z pohledu ochrany obyvatelstva také představují nástroj, dle kterého lze na základě analýzy a interpretace výsledků modelací predikovat oblasti s vysokou koncentrací látky, ve kterých je nezbytné prioritně realizovat záchranné práce a opatření ochrany obyvatelstva. Z tohoto důvodu je většina modelačních softwarových nástrojů a jejich matematické modely zaměřeny na úniky ve vnějším prostředí. Existují sice matematické modely typu CFD, které jsou určeny pro modelaci šíření látek i v uzavřeném prostoru a obdobné modely, které lze v určité míře aplikovat ve vnějším prostředí, přičemž mohou dosahovat vysoce kvalitních výsledků. Jejich náročnost na vstupní data a výpočetní techniku je ale velmi vysoká a v běžných podmínkách chemické bezpečnosti a krizového řízení je z tohoto důvodu jejich využitelnost v současné době minimální. Z pohledu ochrany obyvatelstva je podstatná predikce úniku ve vnějším prostředí a analýza potencionálních dopadů na obyvatelstvo, potažmo životní prostředí. V této oblasti je vhodné realizovat modelaci úniku plynné látky, při které dochází k jejímu šíření do vnějšího prostředí, byť se zdroj úniku může nacházet v uzavřeném prostoru. Nicméně je zde podmínkou přítomnost otevřené komunikace do vnějšího prostředí prostřednictvím například ventilační výpustě, komínu, otevřeného okna apod. V tomto případě by byl pro účely modelace brán jako zdroj úniku látky do vnějšího prostředí onen únikový otvor.

Matematické modely, které jsou určeny pro modelaci chemických úniků ve vnějším prostředí, používají zjednodušený matematický popis šíření těžkého plynu v prostředí a vliv externích faktorů. Tímto se modely dostávají do kompromisní roviny, která umožňuje tvorbu modelací s méně přesnými výsledky, ale za to s menšími nároky na objem a kvalitu vstupních dat. S tímto faktorem souvisí i další omezení běžně používaných matematických modelů šíření těžkých plynů v prostředí, a to, že jsou primárně určeny pro modelaci úniku a šíření látky v přízemní vrstvě, obecně do 1 m nad zemí. Tímto způsobem jsou koncipovány i analyzované matematické modely modulu DEGAS softwarového nástroje TerEx a model Heavy Gas nástroje ALOHA. Primárně lze tedy doporučit jejich běžné použití pro modelace se zadáním zdroje úniku s nulovou výškou nad zemí. V určité míře ovšem tyto nástroje umožňují i modelaci se zdrojem

úniku ve větší výšce. V tomto případě lze využít alternativních postupů, které spočívají ve volbě jiného matematického modelu bez uvedeného omezení nebo v případě modulu DEGAS v modelaci vertikálního úniku látky. U výsledků lze poté ale předpokládat na základě charakteru modelace jejich možnou nižší úroveň validity a přesnosti.

Dále je nezbytné blíže uvažovat i o charakteristice šíření těžkého plynu při úniku ve výškách, kdy při překročení určité hranice se oblak těžkého plynu o vysoké koncentraci v přízemní vrstvě nemusí vytvořit a k převážné disperzi látky dojde již ve vzduchu. Samotné sesedání těžkého plynu k zemi se bude odehrávat v určité vzdálenosti od zdroje úniku v závislosti na výšce úniku a meteorologických podmínkách. Oblast s nejvyššími hodnotami koncentrace látky se v tomto případě nebude nacházet přímo u zdroje úniku. V neposlední řadě je nezbytné uvažovat charakteristiku unikající látky a zejména její molekulovou hmotnost. Obecně vytvářejí na základě fyzikálních vlastností a způsobu skladování oblaka těžkých plynů i látky za standardních podmínek lehčí než vzduch, například amoniak. Dle uvedeného scénáře ale bude docházet k podstatně rychlejší disperzi látky a překonání fyzikálních faktorů, které u ní způsobují tvorbu oblak těžkého plynu, než nabude charakteristiku pozitivně vzlínavého plynu. Z tohoto vyplývá, že i závažnější únik amoniaku může dle popisovaných podmínek představovat nižší úroveň ohrožení v okolí havárie, než by tomu bylo například při úniku chloru.

Softwarové modelace jsou obecně velmi náročné na objem a kvalitu vstupních údajů, aby bylo možné vytvořit kvalitní predikci šíření a disperze těžkého plynu v atmosféře. Řada těchto údajů není při probíhající havárii zpravidla k dispozici a jejich získání je možné až posléze při vyšetřování události. Jedná se zejména o údaje o zdroji úniku, přesné rozměry skladovacího zařízení či zásobníku, tlak látky uvnitř zřízení a rychlosti úniku látky. Dále se částečně jedná o přesné meteorologické údaje, které sice mohou být dohledatelné na různých meteorologických serverech či měřeny v místních podmínkách, ale je nezbytné počítat i s jejich proměnlivostí, která hraje významnou roli zejména při déle trvajících únicích. Modelační softwarové nástroje obecně umožňují tvorbu modelací s nedostatkem vstupních údajů, kdy lze některé parametry zobecnit nebo jejich nastavení vynechat a softwarový nástroj sám doplní průměrné hodnoty. V tomto případě bude kvalita výsledků a jejich validita podstatně nižší než při přesném zadání veškerých vyžadovaných parametrů. Tvorba modelací je rovněž poměrně náročný proces

i z pohledu lidského faktoru, kdy je nezbytné, aby osoba, která modelace pomocí softwarových nástrojů vytváří, měla adekvátní znalosti v této oblasti, byla plně seznámena s jejich obsluhou a výsledky dokázala korektně interpretovat v aktuálních podmínkách.

Při modelaci šíření a rozptylu nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkého plynu v atmosféře je zcela zásadní správná interpretace výsledků. K tomuto účelu modelační softwarové nástroje disponují širokou škálou možností, které je zapotřebí vhodně využít k zobrazení a interpretaci relevantních výsledků. V první řadě je nezbytné výsledky modelací brát s určitou rezervou. I komplexní modelace využívající široké spektrum vstupních dat udávají pouze orientační výsledky. Pro interpretaci výsledků lze doporučit využití předem stanovených hodnotících koncentrací dané látky, které mají určitou výpovědní hodnotu a dokáží napomoci při stanovení odpovídajících opatření ochrany obyvatelstva. Tyto koncentrace lze také vzít v potaz při stanovení způsobu realizace záchranných a likvidačních prací s důrazem na nezbytnou úroveň ochrany zasahujících s využitím osobních ochranných prostředků. V obecné rovině lze doporučit využití koncentrací AEGL 1 až 3, ERPG 1 až 3, koncentraci IDLH a případně jejich variací dle koncentrace PAC 1 až 3. Tyto koncentrace obecně vypovídají o míře ohrožení exponovaných osob dané látky a lze je doporučit jako směrodatné při rozhodnutí o stanovení oblastí, ve kterých bude provedena evakuace či ukrytí a další opatření ochrany obyvatelstva. Z pohledu řešení chemické havárie záchrannými složkami, určení nezbytné úrovně osobní ochrany zasahujících a stanovení evakuace, jsou rovněž vhodné koncentrace HPK a HAU, které jsou používány v podmínkách HZS ČR.

Pro určení přesných hodnot hodnotících koncentrací lze doporučit využití softwarových databází nebezpečných chemických látek a směsí, které mimo jiné udávají hodnoty těchto koncentrací pro různé expoziční doby. Tyto databáze dále uvádějí řadu informací a doporučení pro záchranné složky v oblasti fyzikálně chemických vlastností látky, její nebezpečnosti, doporučení individuální ochrany osob a ochrany obyvatelstva, hasebních a likvidačních prací, první pomoci při zasažení osob a další. Uvedené údaje lze v určité míře nalézt i v bezpečnostní dokumentaci chemických podniků, dokumentaci HZS ČR a případně v bezpečnostních listech. V případě chemické havárie z mobilního zdroje nemusí být však tato dokumentace k dispozici. Blíže se jedná o dokumentaci zdolávání požáru, havarijní karty, bezpečnostní listy jednotlivých chemických látek

a směsí a přepravní dokumentaci, případně lze využít poradní a expertní služby v systému TRINS.

Účelem samotných modelací je v uvedeném ohledu orientační určení, do jaké vzdálenosti od zdroje úniku se může látka vyskytovat v předem definovaných koncentracích. Pro vyobrazení konkrétních výsledků a jejich případného zanesení na mapový podklad lze doporučit softwarový nástroj ALOHA, který oproti nástroji TerEx umožňuje variabilní nastavení hodnotících koncentrací a jejich snadné vyobrazení. Při využití nástroje TerEx je nezbytné doplňující údaje mimo dosah předem stanovených koncentrací vyčítat z generovaného grafu a při grafickém vyobrazení výsledků nelze na mapový podklad zakreslit jiné koncentrace, než jaké jsou předem nastaveny. Na druhou stranu umožňuje tento nástroj snadnější úpravu zanesení výsledků modelací na mapový podklad a jejich orientaci dle směru proudění větru. Při vyhodnocení výsledků modelací je rovněž nezbytné brát v potaz externí faktory, které mohou ovlivňovat šíření těžkých plynů a jejich následnou disperzi v atmosféře, kterými jsou zejména proměnlivost meteorologických podmínek a charakteristika okolního terénu. Tyto faktory jsou do modelací zaneseny pouze v omezené míře a mají zásadní vliv na šíření látky. Pokud se v okolí úniku nacházejí výrazné terénní překážky, například větší budovy či terénní valy, bude únik v daném směru těmito překážkami omezen a bude ve vyšší koncentraci vyplňovat oblast před nimi, případně je může obtékat apod., jak lze sledovat v případě analyzované chemické havárie ve městě Festus.

Z časového hlediska je nezbytné rozdělit vyhodnocení modelací pro jednorázové a déle trvající havárie, jelikož budou mít rozdílnou dynamiku úniku a šíření látky v prostředí a její následné disperze. Pro jednorázové nebo krátce trvající havárie v rozmezí jednotek až maximálně několika desítek minut lze doporučit využití hodnot hodnotících koncentrací pro 30minutovou expoziční dobu. Tato doba se dle analyzovaných havárií ukazuje jako stěžejní, jelikož v iniciálních fázích úniku dochází k nárůstu koncentrace na maximální hodnoty v okolí místa úniku a následně se oblak těžkého plynu šíří v prostředí. Do této doby lze předpokládat výrazné snížení koncentrace látky ve vzdálenějším prostředí na minimální hodnoty. Tento předpoklad blíže potvrzuje modelace dopadů havárie ve městě Graniteville prostřednictvím softwarového nástroje ALOHA a analýza udávané časové osy úniku látky. V podmínkách ČR je dle zákona č. 133/1985 Sb., o požární ochraně, ve znění pozdějších předpisů, stanovena doba dojezdu

jednotek požární ochrany kategorie I do 20 minut [123]. Pokud vezmeme v potaz minimální nezbytnou dobu pro provedení analýzy situace a zahájení záchranných prací, jeví se doba 30 minut jako adekvátní, do které lze po přechozím varování a ukrytí osob zahájit jejich evakuaci z oblastí v blízkosti zdroje úniku a přerušit působení látky na zasažené osoby.

Pro déle trvající havárie v rozmezí desítek minut až hodin lze doporučit využití hodnot hodnotících koncentrací pro 60minutovou expoziční dobu, jelikož reálná expoziční doba zasažených osob unikající látkou může být podstatně delší. Tato doba již dává větší prostor k provedení plošné evakuace osob v širším perimetru. Z časového pohledu je tedy stěžejním opatřením ochrany obyvatelstva bezodkladné varování a ukrytí obyvatel v širším perimetru a jejich následná evakuace. Tato evakuace by měla být realizována v oblastech, ve kterých může koncentrace látky v prostředí přesahovat stanovené hodnoty hodnotících koncentrací pro definovanou expoziční dobu dle výsledků modelací nebo na základě fyzických měření na místě zásahu v rámci chemického průzkumu. Případně lze ve vzdálenějších oblastech od zdroje úniku zvolit ukrytí či invakuaci osob. V tomto případě je ale nezbytné kontinuálně sledovat koncentraci látky v prostředí k možnému přehodnocení tohoto opatření a nařízení následné evakuace s využitím improvizovaných ochranných prostředků. V rámci predikce dopadů chemických havárií lze využít výsledky modelací a jejich interpretaci k odhadu časové osy úniku, k čemuž lze doporučit využití softwarového nástroje ALOHA. Nástroj TerEx časovou osu ve svých výsledcích neuvádí a v tomto případě ji lze odhadovat pouze na základě charakteristiky a dynamiky úniku látky nebo měření na místě zásahu.

Z prostorového hlediska udávají výsledky modelací dosah látky o určité koncentraci od zdroje úniku, přičemž lze využít předem definovaných hodnotících koncentrací nebo vlastních hodnot. Z pohledu vyhodnocení modelací lze doporučit sledování koncentrace látky v oblasti blízkého pole do 100 m od zdroje úniku, oblasti střední vzdálenosti do 200 m a oblasti vzdáleného pole do 1 000 m a více. Tyto vzdálenosti se ukázaly jako prakticky využitelné při vyhodnocení komparativních modelací dopadů vybraných chemických havárií i experimentálního šetření projektu DEGAS. Na základě koncentrace látky v uvedených oblastech lze orientačně určit závažnost chemické havárie a stanovit priority záchranných prací a realizace opatření ochrany obyvatelstva. Samotná opatření by měla být realizována i s přihlédnutím k časové ose úniku a jeho dynamice. Při analýze

a observaci chemické havárie lze dále doporučit sledování viditelné fáze oblaku těžkého plynu, která značí velmi vysokou koncentraci látky v prostoru a lze na ní do určité míry sledovat i směr šíření látky. Jelikož se jedním ze zásadních nedostatků modelací a jejich výsledků ukázala omezená schopnost predikce šíření látky do okolního prostředí mimo směr proudění větru, lze doporučit ustanovení nebezpečné zóny ve všech směrech od zdroje úniku v minimální vzdálenosti 100 m bez ohledu na závažnost havárie. Tato vzdálenost se dle vyhodnocení analyzovaných chemických havárií ukázala jako vhodná a oblast, ve které se může chemická látka vyskytovat ve vysoké a nebezpečné koncentraci. Tato vzdálenost je rovněž udávána Řádem chemické služby jako minimální oblast stanovení nebezpečné zóny pro šířící se rozsáhlá oblaka par [48].

Při současném využití modelací úniku nebezpečných chemických látek a směsí a zmiňovaných softwarových databází lze na základě dostupných informací o chemických látkách a jejich nebezpečných vlastnostech do určité míry predikovat i potencionální dopady na životní prostředí. Při úniku látky a jejím šíření v prostředí může docházet k suché a mokré depozici látky do půdy a může dojít ke kontaminaci povrchových a spodních vod, studní či zdrojů užitkové nebo pitné vody. V závislosti na unikající látce může dojít k poškození a úhynu vegetace, kdy je nezbytná následná rekultivace životního prostředí, případně i jeho dekontaminace. V případě chemické havárie je nezbytné provést důkladný chemický průzkum v zasažené oblasti, včetně observace následků, odběru vzorků z půdy, vodních zdrojů a jejich laboratorní vyhodnocení k přesnějšímu stanovení dopadů na životní prostředí. Jelikož je obecně sledovaným jevem při chemických haváriích setrvání určitého objemu látky v zařízení po iniciální fázi úniku, je v rámci likvidačních prací také nezbytné provést neutralizaci nebo přečerpání zbylé látky. Tento jev blíže závisí na fyzikálních a chemických vlastnostech dané látky, způsobu jejího skladování, naplněnosti skladovacího zařízení a lokalizaci únikového otvoru. Při plánování a realizaci likvidačních prací lze rovněž uplatnit výsledky modelací v propojení s informacemi z databází nebezpečných chemických látek a směsí ke stanovení vhodného postupu těchto prací, požadavků na osobní ochranné prostředky zasahujících osob a vymezení bezprostřední oblasti, ve které budou prováděny za specifického režimu.

7 ZÁVĚR

Disertační práce byla zaměřena na tematiku softwarových modelací úniku, šíření a disperze nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkých plynů v atmosféře. Jejím předmětem bylo v souladu s vytyčenými cíli vymezení problematiky chemické bezpečnosti s bližším zaměřením na softwarové modelace uvedeného jevu a validitu jejich výstupů i využitelnosti v daném tématu. Práce byla navázána na projekt DEGAS, při kterém byly realizovány dva terénní experimenty simulující únik nebezpečné látky ze zařízení. Jeho hlavním výstupem bylo vytvoření stejnojmenného modulu pro modelaci šíření a rozptylu těžkých plynů v atmosféře, který je součástí expertního softwarového nástroje TerEx. Modul DEGAS byl následně využit k modelaci podmínek druhého experimentu a dopadů vybraných chemických havárií, přičemž byly jeho výstupy komparovány s reálnými podmínkami a výsledky modelací softwarového nástroje ALOHA, který byl v tomto případě použit jako referenční.

Na základě prezentovaných výsledků byla identifikována řada nedostatků modelací analyzovaného jevu i použitých softwarových nástrojů a jejich matematických modelů, které se shodují s obecnými nedostatky uvedenými v teoretické části práce. Tyto nedostatky snižují míru přesnosti a validity jejich výstupů, ale nejsou takového rozsahu, který by bránil jejich praktickému využití. Softwarové modelace úniku a šíření nebezpečných chemických látek a směsí jsou vhodným doplňujícím a analytickým nástrojem pro různé využití v rámci chemické bezpečnosti, ochrany obyvatelstva a v určité míře při řešení chemických havárií záchrannými složkami, zejména při doplnění o softwarové databáze nebezpečných chemických látek a směsí. Jejich vhodnost je především pro modelaci provozních typů havárií s nižší rychlostí úniku látky ze zdroje, při kterých udává modul DEGAS i přes určité nedostatky realistický odhad šíření látky v prostředí. Výsledky modelací je ale nezbytné korektně interpretovat, zejména s přihlédnutím k místním terénním a meteorologickým podmínkám, které mohou být proměnné. K tomuto účelu disponují softwarové nástroje řadou funkcionalit umožňující detailní vyhodnocení a interpretaci jejich výstupů, ale výsledky je v jejich současném pojetí nezbytné brát pouze orientačně jako možnou predikci šíření nebezpečných chemických látek a směsí ve formě těžkých plynů v prostředí.

8 SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK

AČR – Armáda České republiky

AEGL – Acute Exposure Guideline Levels

ARIA – Analysis, Research and Information on Accidents

BARPI – Bureau for Analysis of Industrial Risks and Pollutions

BLEVE – Boiling Liquid Expanding Vapor Explosion

BOZP – Bezpečnost a ochrana zdraví při práci

CBRNE – chemické, biologické, radiologické, nukleární a explozivní látky

CFD – Computer Fluid Dynamics

CLP – nařízení Evropského parlamentu o klasifikaci, označování a balení látek a směsí
(Classification, Labelling and Packaging of substances and mixtures)

CSB – Chemical Safety Board

eMARS – Major Accident Reporting System

ERPG – Emergency Response Planning Guidelines

GHS – globálně harmonizovaného systému klasifikace a označování chemikálií
(Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals)

GIS – geografické informační systémy

HAU – havarijní akční úroveň

HPK – havarijní přístupná koncentrace

HZS – hasičský záchranný sbor

HZS ČR – Hasičský záchranný sbor České republiky

IDLH – Immediately Dangerous to Life and Health

IZS – integrovaný záchranný systém

JR – Jack Rabbit

LC – Lethal Concentration

LEL – Lower Explosive Limit

LPG – Liquefied Petroleum Gas

NOEL – No Observable Effect Level

NPK-P – nejvyšší přístupná koncentrace chemických látek v pracovním prostředí

PAC – Protective Action Criteria

PEL – přístupný expoziční limit v rámci pracovní doby

ppm – parts per million

REACH – Nařízení Evropského parlamentu a Rady o registraci, hodnocení, povolování a omezování chemických látek (Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals)

TCDD – 2,3,7,8-Tetrachlorodibenzodioxin

TEEL – Temporary Emergency Exposure Limit

UEL – Upper Explosive Limit

9 SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] EUROSTAT. *Chemicals production and consumption statistics* [online]. In: . [cit. 2022-05-17]. Dostupné z: https://ec.europa.eu/eurostat/statistics-explained/index.php?title=Chemicals_production_and_consumption_statistics#Total_production_of_chemicals
- [2] HONG, Sheng, Nathan LIU a Thomas LUEDI. *What's next for international chemical companies in China?* [online]. In: . [cit. 2021-05-17]. Dostupné z: <https://www.mckinsey.com/industries/chemicals/our-insights/whats-next-for-international-chemical-companies-in-china>
- [3] *Zákon č. 224/2015 Sb., o prevenci závažných havárií způsobených vybranými nebezpečnými chemickými látkami nebo chemickými směsmi a o změně zákona č. 634/2004 Sb., o správních poplatcích, ve znění pozdějších předpisů, (zákon o prevenci závažných havárií).*
- [4] ČAPOUN, Tomáš. *Chemické havárie*. Praha: MV - generální ředitelství Hasičského záchranného sboru ČR, 2009. ISBN 978-80-86640-64-8.
- [5] *ARIA: The ARIA Database* [online]. Ministère de la Transition écologique et solidaire [cit. 2020-11-01]. Dostupné z: <https://www.aria.developpement-durable.gouv.fr/the-barpi/the-aria-database/?lang=en>
- [6] EUROPEAN COMMISSION. *EMARS statistics* [online]. In: . [cit. 2021-05-17]. Dostupné z: <https://emars.jrc.ec.europa.eu/en/emars/statistics/statistics>
- [7] *CSB* [online]. Washington, DC: U.S. Chemical Safety Board [cit. 2021-08-24]. Dostupné z: <https://www.csb.gov>
- [8] *The Japanese Failure Knowledge Database* [online]. Association for the Study of Failure [cit. 2021-08-24]. Dostupné z: <http://www.shippai.org/fkd/en/index.html>
- [9] NEDĚLNÍKOVÁ, Hana a kol. *Statistická ročenka 2020*. Příloha časopisu 112 číslo 3/2021. Praha: Ministerstvo vnitra-generální ředitelství Hasičského záchranného sboru České republiky, 2021.
- [10] MINISTERSTVO DOPRAVY. *Dopravní informační systém DOK* [online]. In: . [cit. 2021-05-17]. Dostupné z: <https://dok.mdcz.cz/dokpub/dok.asp>
- [11] SKŘEHOT, Petr et al. *Prevence nehod a havárií*. Praha: Výzkumný ústav bezpečnosti práce, 2009. ISBN 978-80-86973-73-9.

- [12] PURKAIT, Mihir, Piyal MONDAL, Murchana CHANGMAI, Vikranth VOLLI a Chi-Min SHU. *Hazards and Safety in Process Industries: Case Studies*. 1. Boca Raton: CRC Press, 2021. ISBN 978-0-367-51651-2.
- [13] LEES, Frank P. *Lee's Loss Prevention in the Process Industries: Hazard Identification, Assessment and Control*. 3. ed. Burlington: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. ISBN 07-506-1547-8.
- [14] BOURDEAU, Philippe a Gareth GREEN (ED). SCIENTIFIC GROUP ON METHODOLOGIES FOR THE SAFETY EVALUATION OF CHEMICALS. *Methods for assessing and reducing injury from chemical accidents*. Amstelveen: SCOPE, 1989. ISBN 0471922781.
- [15] KOLEKTIV AUTORŮ. *Ochrana obyvatelstva a krizové řízení: skripta*. Praha: Ministerstvo vnitra - generální ředitelství Hasičského záchranného sboru ČR, 2015. ISBN 978-80-86466-62-0.
- [16] ŠÍN, Robin et al. *Medicína katastrof*. 1. vydání. Praha: Galén, 2017. ISBN 978-807-4922-954.
- [17] KRATOCHVÍLOVÁ, Danuše, Danuše KRATOCHVÍLOVÁ a Libor FOLWARCZNY. *Ochrana obyvatelstva*. 2., aktualiz. vyd. V Ostravě: Sdružení požárního a bezpečnostního inženýrství, 2013. Spektrum (Sdružení požárního a bezpečnostního inženýrství). ISBN 978-80-7385-134-7.
- [18] MATĚJKA, Jiří. *Chemická služba: učební skripta*. Praha: Ministerstvo vnitra - generální ředitelství Hasičského záchranného sboru ČR, 2012. ISBN 978-80-87544-09-9.
- [19] BŘÍZA, Jan et al. *Ochrana obyvatelstva v případech krizových situací a mimořádných událostí nevojenského charakteru*. 1. vydání. Brno: Tribun EU, 2014. ISBN 978-80-263-0722-8.
- [20] NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. *PubChem* [online]. In: . [cit. 2021-05-19]. Dostupné z: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>
- [21] MIKA, Otakar a Lubomír POLÍVKA. *Radiační a chemické havárie*. Praha: Policejní akademie České republiky v Praze, 2010. ISBN 978-80-7251-321-5.
- [22] SIKOROVÁ, Kateřina a Kateřina BLAŽKOVÁ. *Analýza dopadů havárií s účastí nebezpečné látky na životní prostředí*. 1. vydání. V Ostravě: Sdružení požárního a

- bezpečnostního inženýrství, 2018. Spektrum (Sdružení požárního a bezpečnostního inženýrství). ISBN 978-80-7385-211-5.
- [23] MAŠEK, Ivan, Otakar MIKA a Miloš ZEMAN. *Prevence závažných průmyslových havárií*. 1. vydání. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, 2006. ISBN 80-214-3336-1.
- [24] U.S. NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE. *Introduction to CBRNE Concepts* [online]. In: . [cit. 2021-05-19]. Dostupné z: https://www.nlm.nih.gov/dis_courses/cbrne/01-000.html
- [25] PITSCHMANN, Vladimír. *Chemické zbraně a ochrana proti nim*. Praha: Manus, 2011. ISBN 978-80-86571-09-6.
- [26] PAULUS, František. *Analýza hrozeb pro Českou republiku*. Praha: Ministerstvo vnitra - generální ředitelství Hasičského záchranného sboru ČR, 2015.
- [27] MINISTERSTVO VNITRA ČESKÉ REPUBLIKY. *Audit národní bezpečnosti*. Praha: Ministerstvo vnitra ČR, odbor bezpečnostní politiky a prevence kriminality, 2016.
- [28] LACINA, Petr, Otakar MIKA a Kateřina ŠEBKOVÁ. *Nebezpečné chemické látky a směsi*. Brno: Masarykova univerzita, Centrum pro výzkum toxických látek v prostředí, 2013. Recetox. ISBN 978-80-210-6475-1.
- [29] PARKER, Roger Jocelyn. *The Flixborough disaster: report of the Court of Inquiry*. London: H.M.S.O., 1975. ISBN 01-136-1075-0.
- [30] DEVINE, Joseph. *1976 Ammonia Spill of Houston* [online]. In: EZINEARTICLES. [cit. 2019-08-03]. Dostupné z: <http://ezinearticles.com/?1976-Ammonia-Spill-of-Houston&id=1270104>
- [31] FRENCH SUSTAINABLE DEVELOPMENT MINISTRY. *Explosion of a fireworks warehouse May 13, 2000 Enschede The Netherlands*. Paříž: French Sustainable Development Ministry, 2009. No. 17730.
- [32] KROUPA, Miroslav. *Chování obyvatelstva v případě havárie s únikem nebezpečných chemických látek: příručka pro orgány státní správy, územní samosprávy, právnické osoby a podnikající fyzické osoby a obyvatelstvo*. Praha: Ministerstvo vnitra - generální ředitelství Hasičského záchranného sboru ČR, 2004. ISBN 80-866-4023-X.

- [33] ČESKÁ INSPEKCE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ. *Příklady významných vodohospodářských havárií od r. 1964* [online]. In: ČESKÁ INSPEKCE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ. [cit. 2019-08-03]. Dostupné z: <http://www.cizp.cz/Havarie-na-vodach>
- [34] ARNIKA. *Spolana Neratovice* [online]. In: ARNIKA. [cit. 2019-09-03]. Dostupné z: <http://arnika.org/spolana-neratovice#havarie>
- [35] *Spolana sečetla uniklý chlór* [online]. MAFRA, a. s., 2002 [cit. 2022-07-11]. Dostupné z: https://www.idnes.cz/zpravy/domaci/spolana-secetla-unikly-chlor.A020829_164833_domaci_has
- [36] HASIČSKÝ ZÁCHRANNÝ SBOR JIHOMORAVSKÉHO KRAJE. *Únik amoniaku na zimním stadiónu ve Znojmě* [online]. In: HASIČSKÝ ZÁCHRANNÝ SBOR JIHOMORAVSKÉHO KRAJE. [cit. 2019-10-03]. Dostupné z: <http://www.firebrno.cz/pracoviste-laborator/unik-amoniaku-na-zimnim-stadionu-ve-znojme>
- [37] THE COUNCIL OF THE EUROPEAN COMMUNITIES. *Council Directive 82/501/EEC of 24 June 1982 on the major-accident hazards of certain industrial activities* [online]. In: THE COUNCIL OF THE EUROPEAN COMMUNITIES. [cit. 2019-10-03]. Dostupné z: <http://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/HTML/?uri=CELEX:31982L0501&from=EN>. 31982L0501
- [38] THE COUNCIL OF THE EUROPEAN UNION. *Council Directive 96/82/EC of 9 December 1996 on the control of major-accident hazards involving dangerous substances* [online]. In: THE COUNCIL OF THE EUROPEAN UNION. [cit. 2019-10-04]. Dostupné z: <http://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/HTML/?uri=CELEX:01996L0082-20120813&from=EN>. 1996L0082
- [39] THE EUROPEAN PARLIAMENT AND THE COUNCIL OF THE EUROPEAN UNION. *Directive 2012/18/EU OF THE EUROPEAN PARLIAMENT AND OF THE COUNCIL of 4 July 2012 on the control of major-accident hazards involving dangerous substances, amending and subsequently repealing Council Directive 96/82/EC* [online]. In: THE EUROPEAN PARLIAMENT AND THE COUNCIL OF THE EUROPEAN UNION. [cit. 2019-10-04]. Dostupné z: [166](http://eur-</p></div><div data-bbox=)

lex.europa.eu/legal-
content/EN/TXT/HTML/?uri=CELEX:32012L0018&from=EN. L 197/1

- [40] EUROPEAN COMMISSION. *Industrial accidents* [online]. In: EUROPEAN COMMISSION. [cit. 2019-10-05]. Dostupné z: <http://ec.europa.eu/environment/seveso/>
- [41] RICHTER, Rostislav. *Slovník pojmů krizového řízení*. Vydání první. Praha: Ministerstvo vnitra, Generální ředitelství Hasičského záchranného sboru ČR, 2018. ISBN 978-80-87544-91-4.
- [42] *Vyhláška č. 226/2015 Sb., o zásadách pro vymezení zóny havarijního plánování a postupu při jejím vymezení a o náležitostech obsahu vnějšího havarijního plánu a jeho struktury.*
- [43] *Vyhláška č. 225/2015 Sb., o stanovení rozsahu bezpečnostních opatření fyzické ochrany objektu zařazeného do skupiny A nebo skupiny B.*
- [44] *Zákon č. 350/2011 Sb., o chemických látkách a chemických směsích a o změně některých zákonů (chemický zákon).*
- [45] *Zákon č. 239/2000 Sb., o integrovaném záchranném systému a o změně některých zákonů.*
- [46] *Vyhláška Ministerstva vnitra č. 328/2001 Sb., o některých podrobnostech zabezpečení integrovaného záchranného systému.*
- [47] *Ústřední poplachový plán Integrovaného záchranného systému: Stav k 1. lednu 2021*. Ministerstvo vnitra-generální ředitelství Hasičského záchranného sboru České republiky, 2021. Č. j. MV-184128-1/PO-IZS-2020.
- [48] GENERÁLNÍ ŘEDITELSTVÍ HASIČSKÉHO ZÁCHRANNÉHO SBORU ČESKÉ REPUBLIKY. *Řád chemické služby Hasičského záchranného sboru ČR*. Vydání první. Praha: Ministerstvo vnitra, 2017. ISBN 978-80-87544-49-5.
- [49] UNITED NATIONS. *Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS)*. 8. aktualizované vydání. New York/Geneva: United Nations, 2019. ISBN 978-92-1-004083-9.
- [50] *NAŘÍZENÍ EVROPSKÉHO PARLAMENTU A RADY (ES) č. 1272/2008 ze dne 16. prosince 2008 o klasifikaci, označování a balení látek a směsí, o změně a zrušení směrnic 67/548/EHS a 1999/45/ES a o změně nařízení (ES) č. 1907/2006.*

- [51] ECONOMIC COMMISSION FOR EUROPE. *European Agreement concerning the International Carriage of Dangerous Goods by Road (ADR 2019)*. Geneva: United Nations, 2018. ISBN 978-92-1-139163-3.
- [52] *CAMEO Chemicals: version 2.7.1 rev 3*. [online]. National Oceanic and Atmospheric Administration, 2021 [cit. 2021-05-22]. Dostupné z: <https://cameochemicals.noaa.gov>
- [53] *Databáze nebezpečných látek MEDIS-ALARM* [online]. MEDISTYL, spol. s r.o., 2021 [cit. 2021-05-22]. Dostupné z: <https://www.medistyl.info/index.php/cz/databaze-nebezpecnych-latek/databaze-nebezpecnych-latek-medis-alarm>
- [54] SKŘEHOT, Petr A. Náhled do problematiky těžkých plynů a modelování jejich rozptylu. In: *Aktuálne otázky bezpečnosti práce*. Košice: TU v Košiciach, 2015. ISBN 978-80-553-2302-2.
- [55] *Engineering ToolBox* [online]. 2001 [cit. 2020-08-17]. Dostupné z: https://www.engineeringtoolbox.com/gas-density-d_158.html
- [56] SKŘEHOT, Petr, Jakub MAREK, František HOUSER, Zdeněk HON, Martin STANĚK, Michaela MELICHAROVÁ, Zbyněk JAŇOUR a Petr KORBA. Predikce vzniku a šíření těžkého plynu při chemických haváriích. *Chemické listy*. 2019, **113**(9), 553-558. ISSN 1213-7103.
- [57] SKŘEHOT, Petr, Zdeněk HON a Michaela MELICHAROVÁ. Nástroje pro modelování roptylu těžkého plynu určených pro predikci následků chemických havárií. In: *Riešenie krízových situácií v špecifickom prostredí*. Žilina: Fakulta bezpečnostného inžinierstva ŽU, 2015. ISBN 9788055410241.
- [58] DU, Yang, Yi ZHOU, Yinchang LI, Dewen ZHOU, Peili ZHANG a Peiwen WANG. Experimental Simulation on Oil Gas Spreading in the Complex Confined Spaces. *Procedia Engineering*. 2012, **45**, 360-365. ISSN 18777058. Dostupné z: [doi:10.1016/j.proeng.2012.08.171](https://doi.org/10.1016/j.proeng.2012.08.171)
- [59] MARKIEWICZ, Maria. A Review of Mathematical Models for the Atmospheric Dispersion of Heavy Gases. Part I. A Classification of Models. *Ecological Chemistry and Engineering S*. 2012, **19**(3), 297-314. ISSN 1898-6196. Dostupné z: [doi:10.2478/v10216-011-0022-y](https://doi.org/10.2478/v10216-011-0022-y)

- [60] SKŘEHOT, Petr. *Rozptyl těžkého plynu v atmosféře: teorie - modely - experimenty*. V Praze: T-SOFT, 2018. ISBN 978-80-905401-2-5.
- [61] ZENG, Yousheng a Jon MORRIS. Detection limits of optical gas imagers as a function of temperature differential and distance. *Journal of the Air & Waste Management Association*. 2019, **69**(3), 351-361. Dostupné z: doi:10.1080/10962247.2018.1540366
- [62] DEPARTMENT OF HOMELAND SECURITY. *Feature Article: Journal Highlights Groundbreaking S&T Research on Chlorine Spread* [online]. In: . 2020 [cit. 2021-05-21]. Dostupné z: <https://www.dhs.gov/science-and-technology/news/2020/11/12/feature-article-journal-highlights-groundbreaking-st-research-on-chlorine-spread>
- [63] DONG, Longxiang, Hongchao ZUO, Liang HU, Bin YANG, Licheng LI a Liyang WU. Simulation of heavy gas dispersion in a large indoor space using CFD model. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2017, **46**, 1-12. ISSN 09504230. Dostupné z: doi:10.1016/j.jlp.2017.01.012
- [64] SLUKA, Vilém. *Výkladový terminologický slovník některých pojmů používaných v analýze a hodnocení rizik pro účely zákona o prevenci závažných havárií*. Praha: Výzkumný ústav bezpečnosti práce, 2007.
- [65] UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. *About Acute Exposure Guideline Levels (AEGs)* [online]. In: UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. [cit. 2020-05-09]. Dostupné z: <https://www.epa.gov/aegl/about-acute-exposure-guideline-levels-aegls>
- [66] JONES, Robert. *ALOHA® (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) 5.4.4 Technical Documentation*. Seattle: National Oceanic and Atmospheric Administration, 2013.
- [67] YOO, Byungtae a Sang CHOI. Emergency Evacuation Plan for Hazardous Chemicals Leakage Accidents Using GIS-based Risk Analysis Techniques in South Korea. *International Journal of Environmental Research and Public Health*. 2019, **16**(11). ISSN 1660-4601. Dostupné z: doi:10.3390/ijerph16111948
- [68] MIKA, Otakar J. Modelování havarijních dopadů nebezpečných chemických látek. *Rescue Report*. (4). ISSN 1212-0456.

- [69] PRAVEEN, Patel. Hazard Evaluation Using Aloha Tool in Storage Area of an Oil Refinery. *International Journal of Research in Engineering and Technology*. 2015, **04**(12), 203-209. ISSN 23217308. Dostupné z: doi:10.15623/ijret.2015.0412040
- [70] NABHANI, Nader a Amir ROSTAMZADEH. Consequence Modeling of Ammonia Storage Tank in a Chemical Plant - a Case Study. *International Journal of Mechanical and Production Engineering*. 2015, **3**(4), 11-13. ISSN 2320-2092.
- [71] LEELÖSSY, Ádám, Ferenc MOLNÁR, Ferenc IZSÁK, Ágnes HAVASI, István LAGZI a Róbert MÉSZÁROS. Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere: a review. *Open Geosciences*. 2014, **6**(3). ISSN 2391-5447. Dostupné z: doi:10.2478/s13533-012-0188-6
- [72] MOHAMED, Ayman, Alam ELDIEN a Amany SAIF. Air Quality Assessment of West Port-Said Industrial Region, Egypt. In: *ICFDII-EG-4006*. Alexandria, 2013.
- [73] EXPLOSION RESEARCH INSTITUTE INC. *Support Business related to Damage Assessment caused by BLEVE Phenomenon Explosion* [online]. In: . [cit. 2021-05-21]. Dostupné z: <http://bakuhatu.jp/en/explosion-2/bleve/>
- [74] HOLLIDAY, Rochard. *Safety and Sustainability: A new standard of safety for onshore passive fire protection* [online]. In: . [cit. 2021-05-21]. Dostupné z: <http://www.gasprocessingnews.com/columns/202012/safety-and-sustainability-a-new-standard-of-safety-for-onshore-passive-fire-protection.aspx>
- [75] THE NETHERLANDS ORGANIZATION OF APPLIED SCIENTIFIC RESEARCH. *Methods for the calculation of physical effects: resulting from releases of hazardous substances (liquids and gases)*. 3. ed. Voorburg: Directorate-General of Labour of the Ministry of Social Affairs and Employment, 2005. CPR (Series), no. 14E.
- [76] WITLOX, Hank. *Overview Of Consequence Modelling In The Hazard Assessment Package Phast*. DNV Software, 2010.
- [77] KASHI, Eslam. Temperature Gradient and Wind Profile Effects on Heavy Gas Dispersion in Build up Area. *Australian Journal of Basic and Applied Sciences*. 2010, **12**(4). ISSN 6010-6020.
- [78] HAVLOVÁ, Michaela. *TerEx: Uživatelský manuál*. Praha: T-SOFT a.s., 2012.

- [79] UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. *RMP*Comp* [online]. In: UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. [cit. 2020-10-02]. Dostupné z: <https://www.epa.gov/rmp/rmpcomp>
- [80] ŠENOVSÝ, Pavel. *Modelování následku mimorádných událostí: Skripta*. 1. vydání. Ostrava: VŠB - Technická univerzita Ostrava, Fakulta bezpečnostního inženýrství, 2020.
- [81] HON, Zdeněk a Martin STANĚK. Vývoj validního rozptylového modelu určeného pro predikci šíření těžkého plynu v rámci chemických havárií. In: *Riešenie krízových situácií v špecifickom prostredí*. Žilina: Fakulta bezpečnostného inžinierstva UNIZA, 2017. ISBN 978-80-554-1332-7.
- [82] GANT, Simon, Graham TICKLE, Adrian KELSEY a Harvey TUCKER. DRIFT dispersion model predictions for the Jack Rabbit II model inter-comparison exercise. *Atmospheric Environment*. 2021, **244**. ISSN 13522310. Dostupné z: [doi:10.1016/j.atmosenv.2020.117717](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2020.117717)
- [83] BYRNES, Andy, Hank DUPONT, David MATTHEW, Jack MCCARTT, Gregory NOLL a Wayne YODER. *The Jack Rabbit II Project's Impacts on Emergency Responders: Final Report*. 1. vydání. Utah: Utah Valley University, 2017.
- [84] *Air Quality Dispersion Modeling - Alternative Models* [online]. United States Environmental Protection Agency [cit. 2021-05-23]. Dostupné z: <https://www.epa.gov/scram/air-quality-dispersion-modeling-alternative-models#adam>
- [85] MARKIEWICZ, Maria. Mathematical modeling of the heavy gas dispersion. In: *Models and techniques for health and environmental hazard assessment and management*. Otwock-Swierk: Institute of Atomic Energy, 2006, s. 279-302. ISBN 978-1-4020-3776-4.
- [86] PALAZZI, Emilio, Marco DE FAVERI, Giuseppe FUMAROLA a Giuseppe FERRAILOLO. Diffusion from a steady source of short duration. *Atmospheric Environment (1967)*. 1982, **16**(12), 2785-2790. ISSN 00046981. Dostupné z: [doi:10.1016/0004-6981\(82\)90029-4](https://doi.org/10.1016/0004-6981(82)90029-4)
- [87] COLENBRANDER, G. W. A mathematical model for the transient behaviour of dense vapour clouds. *3rd International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries*. Basel, Switzerland, 1980.

- [88] POST, L., et al. *HGSYSTEM 3.0: Technical Reference Manual and User's Guide*. Washington, DC: American Petroleum Institute, 1995.
- [89] UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. *What is the CAMEO software suite?* [online]. In: UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. [cit. 2020-09-02]. Dostupné z: <https://www.epa.gov/cameo/what-cameo-software-suite>
- [90] KOLÍNSKÝ, Oldřich. *Projekt OPTIZON* [online]. In: . [cit. 2020-09-03]. Dostupné z: <http://optizon.vubp.cz>
- [91] BARTA, Jiří a Tomáš LUDÍK. *ALOHA – modelování a simulace: Studijní pomůcka*. 1. vydání. Brno: Univerzita obrany, 2012.
- [92] *HGSYSTEM* [online]. HGSYSTEM, 1998 [cit. 2021-08-23]. Dostupné z: <http://www.hgsystem.com/hgweb.html>
- [93] SKŘÍNSKÝ, Jan. Analysis of existing approaches to risk analyses and calculation method for emergency planning zone used in Italy. *Časopis výzkumu a aplikací v profesionální bezpečnosti*. 2013, **1**(6). ISSN 1803-3687.
- [94] TLP SOLUTIONS. *Rozex Alarm* [online]. In: TLP SOLUTIONS. [cit. 2020-10-06]. Dostupné z: <http://www.tlp-emergency.com/rozex.html>
- [95] *FLACS-EFFECTS* [online]. GEXCON, 2021 [cit. 2021-05-22]. Dostupné z: <https://www.gexcon.com/products-services/effects-consequence-modelling-software/>
- [96] *CO2 measure LUTRON CO2-9904SD* [online]. Lutron Instruments, 2021 [cit. 2021-08-25]. Dostupné z: <https://www.lutroninstruments.eu/co-and-co2-meters/co2-measure-lutron-co2-9904sd/>
- [97] *CO2+humidity+temperature meter MCH-383SD* [online]. Lutron Instruments, 2021 [cit. 2021-08-25]. Dostupné z: <https://www.lutroninstruments.eu/with-recording/co2-humidity-temperature-meter-mch-383sd/>
- [98] HARRISON, William, David LARY, Brian NATHAN a Alec MOORE. The Neighborhood Scale Variability of Airborne Particulates. *Journal of Environmental Protection*. 2015, **06**(05), 464-476. ISSN 2152-2197. Dostupné z: [doi:10.4236/jep.2015.65045](https://doi.org/10.4236/jep.2015.65045)
- [99] *Gas Encyclopedia Air Liquide* [online]. In: . Air Liquide [cit. 2021-05-19]. Dostupné z: <https://encyclopedia.airliquide.com>

- [100] KHAN, Noohi. Introduction to Statistical Tests of Significance. *Research & reviews : journal of statistics*. 2021, **10**(2), 17-22. Dostupné z: doi:10.37591/RRJoST
- [101] *TerEx: Terroristic Expert* [online]. In: . T-SOFT [cit. 2021-11-20]. Dostupné z: terex.tsoft.cz
- [102] U.S. CHEMICAL SAFETY AND HAZARD INVESTIGATION BOARD. *Investigation Report: Chlorine Release DPC Enterprises, L.P.* Washington D.C.: U.S. Chemical Safety And Hazard Investigation Board, 2003. Repport no. 2002-04-I-MO.
- [103] NATIONAL TRANSPORTATION SAFETY BOARD. *Collision of Norfolk Southern Freight Train 192 With Standing Norfolk Southern Local Train P22 With Subsequent Hazardous Materials Release at Graniteville, South Carolina January 6, 2005: Railroad Accident Report NTSB/RAR-05/04*. Washington, D.C.: National Transportation Safety Board, 2005. PB2005-916304.
- [104] FRENCH SUSTAINABLE DEVELOPMENT MINISTRY. *Vinyl chloride leak in a chemical plant: February 3, 2004, TAVAUX (Jura - 39), France*. Paříž: French Sustainable Development Ministry, 2006. N° 26363.
- [105] *St. Louis, MO Weather History* [online]. TWC Product and Technology LLC, 2022 [cit. 2022-01-10]. Dostupné z: <https://www.wunderground.com/history/daily/us/mo/festus/KSTL/date/2002-8-14>
- [106] MATTY, Allen D. *Field Guide to Tank Cars*. 3. vydání. Washington, DC: Association of American Railroads, 2017.
- [107] HANNA, Steven, Seshu DHARMAVARAM, John ZHANG, Ian SYKES, Henk WITLOX, Shah KHAJEHNAJAFI a Kay KOSLAN. Comparison of Six Widely-Used Dense Gas Dispersion Models for Three Actual Railcar Accidents. *Air Pollution Modeling and Its Application XIX*. Dordrecht: Springer Netherlands, 2008, 443-451. NATO Science for Peace and Security Series. ISBN 978-1-4020-8452-2. Dostupné z: doi:10.1007/978-1-4020-8453-9_49
- [108] Festus, MO 2002 Chlorine Leak. In: *YouTube* [online]. [cit. 2022-02-06]. Dostupné z: https://www.youtube.com/watch?v=FDJai_WVeGI&t=199s
- [109] CHLORINE. In: *CAMEO Chemicals: Verze 2.7.1 rev 3* [online]. [cit. 2022-02-06]. Dostupné z: <https://cameochemicals.noaa.gov/chemical/2862>

- [110] *Augusta, GA Weather History* [online]. TWC Product and Technology LLC, 2022 [cit. 2022-01-10]. Dostupné z: <https://www.wunderground.com/history/daily/us/ga/augusta/KAGS/date/2005-1-6>
- [111] OGLE, Russell, Marcus MEGERLE, Delmar MORRISON a Andrew CARPENTER. Explosion caused by flashing liquid in a process vessel. *Journal of Hazardous Materials*. 2004, **115**(1-3), 133-140. ISSN 03043894. Dostupné z: doi:10.1016/j.jhazmat.2004.06.006
- [112] *Tavaux, Jura, France Weather History* [online]. TWC Product and Technology LLC, 2022 [cit. 2022-05-30]. Dostupné z: <https://www.wunderground.com/history/daily/fr/tavaux/LFGJ/date/2004-2-3>
- [113] WORLD HEALTH ORGANIZATION. *Vinyl Chloride*. 1. Ženeva: World Health Organization, 1999. ISBN 92-4-157215-9.
- [114] KERNBACH-WIGHTON, G., H. KIJEWSKI, P. SCHWANKE, P. SAUR a R. SPRUNG. Clinical and morphological aspects of death due to liquid nitrogen. *International Journal of Legal Medicine*. 1998, **111**(4), 191-195. ISSN 0937-9827. Dostupné z: doi:10.1007/s004140050148
- [115] *Workswell GIS-320* [online]. San Francisco: Workswell, 2019 [cit. 2022-07-17]. Dostupné z: <https://www.drone-thermal-camera.com/products/workswell-gis-320/>
- [116] *SENSORS: CO2 SENSORS* [online]. Ormond Beach: CO2Meter, 2022 [cit. 2022-07-17]. Dostupné z: <https://forum.arduino.cc/t/how-to-get-500-000ppm-value-of-co2-using-any-of-gas-sensors/386467/4>
- [117] *Carbon Dioxide Sensor Products* [online]. Cumbernauld: Gas Sensing Solutions, 2022 [cit. 2022-07-18]. Dostupné z: <https://www.gassensing.co.uk/products/products>
- [118] *Jack Rabbit Program* [online]. Orem: Utah Valley University, 2022 [cit. 2022-07-19]. Dostupné z: <https://www.uvu.edu/es/jack-rabbit/>
- [119] HANNA, Steven, Rex BRITTER, Edward ARGENTA a Joseph CHANG. The Jack Rabbit chlorine release experiments: Implications of dense gas removal from a depression and downwind concentrations. *Journal of Hazardous Materials*. 2012, **213-214**, 406-412. ISSN 03043894. Dostupné z: doi:10.1016/j.jhazmat.2012.02.013
- [120] GANT, Simon, Jeffrey WEIL, Luca DELLE MONACHE et al. Dense gas dispersion model development and testing for the Jack Rabbit II phase I chlorine

release experiments. *Atmospheric Environment*. 2018, **192**, 218-240. ISSN 13522310. Dostupné z: doi:10.1016/j.atmosenv.2018.08.009

- [121] NICHOLSON, Damon, Norman LIAN, Allison HEDRICK a Eric SCHMIDT. *Final Test Report for Jack Rabbit (JR) II*. Dugway: West Desert Test Center, 2017. WDTC-SPD-FTR-001.
- [122] FOX, Shannon a Donald STORWOLD. *Project Jack Rabbit: Field Tests*. 1. Washington D.C.: U.S. Department of Homeland Security, Science & Technology Directorate, 2011. CSAC 11-006.
- [123] *Zákon České národní rady č. 133/1985 Sb., o požární ochraně.*

10 SEZNAM POUŽITÝCH OBRÁZKŮ

| | |
|---|-----|
| Obrázek 1: Ukázka šíření těžkého plynu, chloru, v experimentálním prostředí s patrnou první a druhou fází [62] | 37 |
| Obrázek 2: Ukázka šíření těžkého plynu, oxidu uhličitého, při úniku typu JET a tvorba viditelných oblak o vysoké koncentraci u v běžných podmínkách nepozorovatelné látky [60]..... | 38 |
| Obrázek 3: Grafické vyobrazení modelů PLUME a PUFF ve vertikální rovině [71] | 42 |
| Obrázek 4: Grafické vyobrazení havarijního modelu PLUME v horizontální rovině dle Gaussovského modelu [72]..... | 43 |
| Obrázek 5: Grafické vyobrazení havarijního modelu BLEVE [73] | 43 |
| Obrázek 6: Ukázka havarijního modelu JET FIRE [74]..... | 43 |
| Obrázek 7: Situační schéma prvního, ověřovacího experimentu [60]..... | 72 |
| Obrázek 8: Situační schéma druhého, ostrého experimentu [60] | 74 |
| Obrázek 9: Vyobrazení šíření stopovače těžkého plynu v čase a prostoru při druhém experimentu projektu DEGAS [60] | 88 |
| Obrázek 10: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru dle podmínek experimentu | 98 |
| Obrázek 11: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Festus | 106 |
| Obrázek 12: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Graniteville | 111 |
| Obrázek 13: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru havárie ve městě Tavaux..... | 116 |
| Obrázek 14: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru prostřednictvím série modelů pro havárii ve městě Festus [107] | 146 |
| Obrázek 15: Grafické znázornění vypočtené koncentrace látky v prostoru prostřednictvím série modelů pro havárii ve městě Graniteville [107]..... | 148 |

11 SEZNAM POUŽITÝCH TABULEK

| | |
|--|-----|
| Tabulka 1: Vybrané nebezpečné chemické látky a směsi zastoupené v rámci stacionárních zdrojů ohrožení [15, 19, 20]..... | 19 |
| Tabulka 2: Dopady havárií s výskytem látek CBRNE [24]..... | 21 |
| Tabulka 3: Přehled vybraných nebezpečných chemických látek a směsí s vyjádřením jejich nebezpečnosti [15, 19, 52, 53] | 35 |
| Tabulka 4: Odhad třídy stability atmosféry za specifických podmínek (Pasquillova-Giffordova-Turnerova typizace) [11, 66]..... | 48 |
| Tabulka 5: Uvedení orientační drsnosti terénu dle typu krajiny [66] | 51 |
| Tabulka 6: Dělení a příklady matematických modelů určených pro modelaci úniku nebezpečných chemických látek a směsí v atmosféře [59, 60, 75, 84] | 57 |
| Tabulka 7: Vybrané vlastnosti oxidu uhličitého [52, 53] | 81 |
| Tabulka 8: Odhad koncentrace stopovače těžkého plynu při experimentálním úniku v blízkém poli [60]..... | 90 |
| Tabulka 9: Výsledky modelace podmínek experimentu dle modulu DEGAS a nástroje ALOHA | 97 |
| Tabulka 10: Výsledky modelace havárie ve městě Festus..... | 105 |
| Tabulka 11: Výsledky modelace havárie ve městě Graniteville..... | 110 |
| Tabulka 12: Výsledky modelace havárie ve městě Tavaux | 115 |
| Tabulka 13: Shrnutí kladů a záporů analyzovaných softwarových nástrojů a matematických modelů | 124 |
| Tabulka 14: Komparativní výsledky modelací havárie ve městě Festus [107] | 145 |
| Tabulka 15: Komparativní výsledky modelací havárie ve městě Graniteville [107].... | 147 |

12 SEZNAM PŘÍLOH

| | |
|---|----|
| Příloha 1: Fotodokumentace experimentálního šetření projektu DEGAS..... | 1 |
| Příloha 2: Výstupy modelací druhého experimentu projektu DEGAS dle softwarového nástroje TerEx a ALOHA..... | 3 |
| Příloha 3: Vyobrazení dopadů chemických havárií ve městě Festus a Graniteville | 7 |
| Příloha 4: Výstupy modelací dopadů havárie ve městě Festus dle softwarového nástroje TerEx a ALOHA | 8 |
| Příloha 5: Výstupy modelací dopadů havárie ve městě Graniteville dle softwarového nástroje TerEx a ALOHA..... | 12 |
| Příloha 6: Výstupy modelací dopadů havárie ve městě Tavaux dle softwarového nástroje TerEx a ALOHA | 16 |

PŘÍLOHY

Příloha 1: Fotodokumentace experimentálního šetření projektu DEGAS (Zdroj: fotodokumentace projektu DEGAS)

1. experiment



2. experiment





Příloha 2: Výstupy modelací druhého experimentu projektu DEGAS dle softwarového nástroje TerEx a ALOHA (Zdroj: TerEx, ALOHA)

DEGAS - rozptyl těžkých plynů

Vstupní parametry

| | |
|-----------------------------------|------------------------------------|
| Látka | oxid uhličitý |
| Výška měření větru/teploty | 3 m |
| Teplota vzduchu | 8 °C |
| Rychlost větru | 1 m/s |
| Relativní vlhkost | 75 % |
| Zatáženo | 100 % |
| Doba vzniku | Den - jaro |
| Typ atmosférické stálosti | Izotermie - neutrální |
| Typ povrchu ve směru šíření látky | Rovina |
| Typ rozptylu | Horizontální tryskový únik (jet) |
| Teplota látky | -78,5 °C (po přepočtu) |
| Rychlost úniku látky | 4,12574682347664 kg/s |
| Plocha otvoru | 0,00125663706143592 m ² |
| Trvání úniku | 960 s |
| Přetlak látky | 1800 kPa |
| Výška otvoru nad zemí | 0 m |

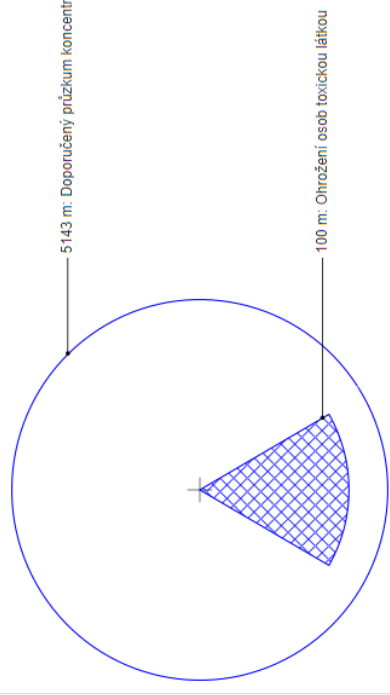
Doporučený průzkum koncentrace plynu

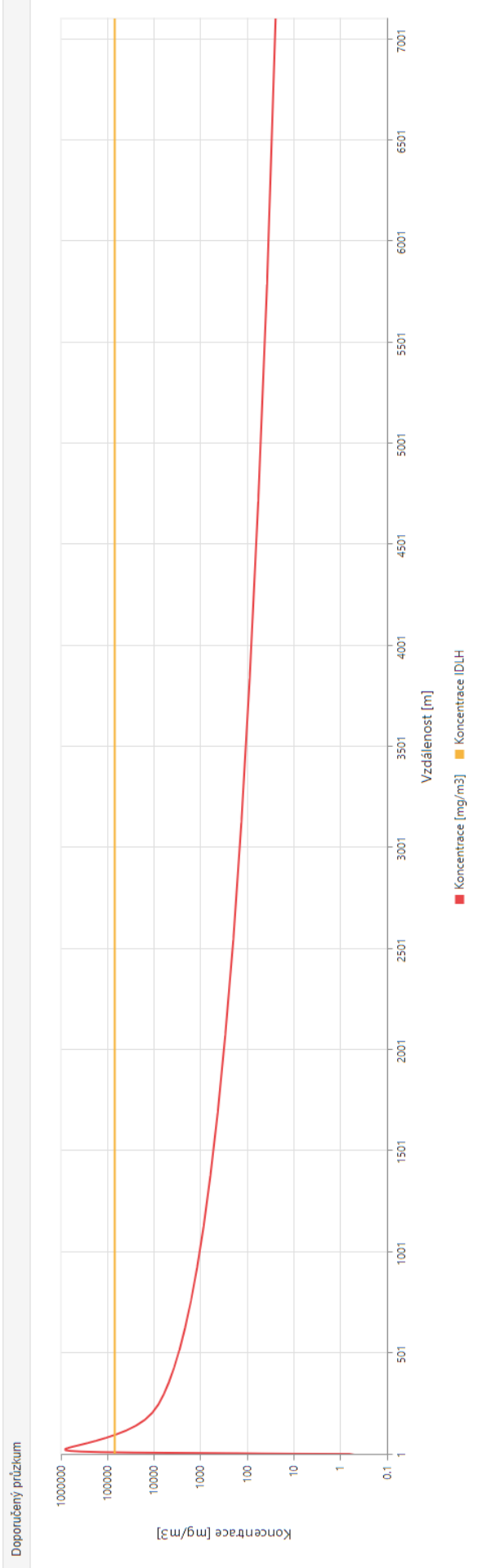
EVAKUACE DO VZDÁLENOSTI 5143 m

Výsledek výpočtu

| | |
|--------------------------------------|--|
| Ohrožení osob toxickou látkou | 100 m [Koncentrace: 70 g/m ³] |
| Doporučený průzkum koncentrace plynu | 5143 m [Koncentrace: 50 mg/m ³] |

Typ stopy





Modelace ALOHA 1

SITE DATA:

Location: BECHYNE, CESKA REPUBLIKA
Building Air Exchanges Per Hour: 1 (user specified)
Time: April 10, 2017 1000 hours ST (user specified)

CHEMICAL DATA:

Chemical Name: CARBON DIOXIDE
CAS Number: 124-38-9 Molecular Weight: 44.01 g/mol
IDLH: 40000 ppm
Ambient Boiling Point: -78.5° C
Vapor Pressure at Ambient Temperature: greater than 1 atm
Ambient Saturation Concentration: 1,000,000 ppm or 100.0%

ATMOSPHERIC DATA: (MANUAL INPUT OF DATA)

Wind: 1 meters/second from 300° true at 3 meters
Ground Roughness: 2.1 centimeters Cloud Cover: 10 tenths
Air Temperature: 8° C Stability Class: D
No Inversion Height Relative Humidity: 75%

SOURCE STRENGTH:

Leak from short pipe or valve in horizontal cylindrical tank
Non-flammable chemical is escaping from tank
Tank Diameter: 1.8 meters Tank Length: 4.13 meters
Tank Volume: 10,510 liters
Tank contains liquid Internal Temperature: 8° C
Chemical Mass in Tank: 6000 kilograms
Tank is 60% full
Circular Opening Diameter: 4 centimeters
Opening is 0 meters from tank bottom
Release Duration: 4 minutes
Max Average Sustained Release Rate: 1,950 kilograms/min
(averaged over a minute or more)
Total Amount Released: 6,000 kilograms
Note: The chemical escaped as a mixture of gas and aerosol (two phase flow).

THREAT ZONE: (HEAVY GAS SELECTED)

Model Run: Heavy Gas
Red : 205 meters --- (40000 ppm = IDLH)
Orange: 215 meters --- (70 grams/(cu m))
Yellow: 3.9 kilometers --- (50 mg/(cu m))

Příloha 3: Vyobrazení dopadů chemických havárií ve městě Festus a Graniteville



Vyobrazení havárie ve městě Festus

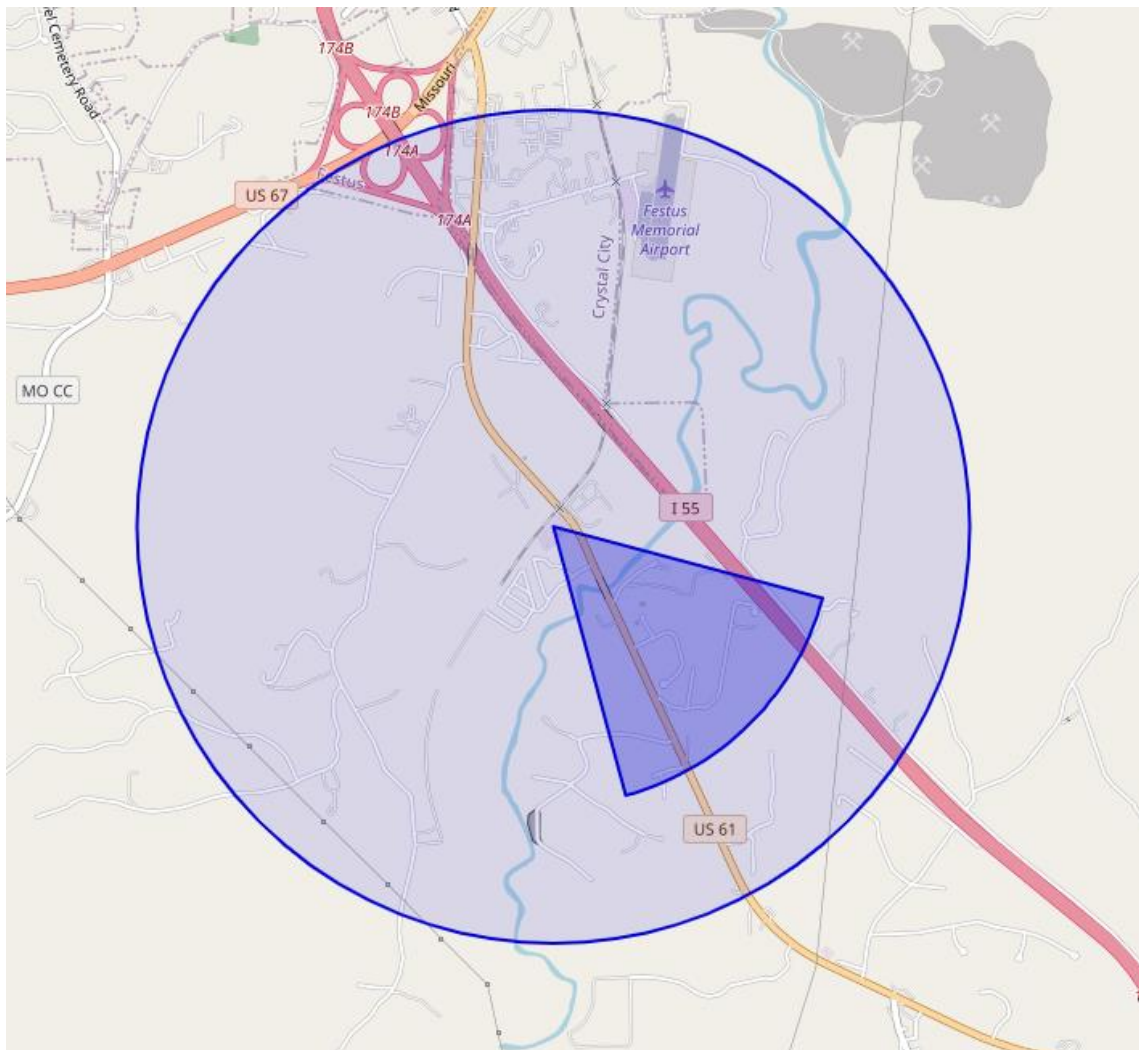
(Zdroj: <https://www.csb.gov/assets/1/17/dpc2.jpg?14085>)



Vyobrazení havárie ve městě Graniteville

(Zdroj: <https://mx-schroeder.medium.com/invisible-death-the-2005-graniteville-train-collision-e4c91d484a5b>)

Příloha 4: Výstupy modelací dopadů havárie ve městě Festus dle softwarového nástroje TerEx a ALOHA (Zdroj: TerEx, ALOHA)



DEGAS - rozptyl těžkých plynů

Vstupní parametry

| | |
|-----------------------------------|-------------------------------------|
| Látka | chlór |
| Výška měření větru/teploty | 10 m |
| Teplota vzduchu | 21 °C |
| Rychlost větru | 8,25 m/s |
| Relativní vlhkost | 99 % |
| Zaiaženo | 100 % |
| Doba vzniku | Den - léto |
| Typ atmosférické stálosti | Izotermie - neutrální |
| Typ povrchu ve směru šíření látky | Zemědělská krajina |
| Typ rozptýlu | Horizontální tryskový únik (jet) |
| Teplota látky | -34 °C (po přepočtu) |
| Rychlost uniku látky | 1,47853686014606 kg/s |
| Plocha otvoru | 0,000506707479097488 m ² |
| Trvání úniku | 3600 s |
| Přetlak látky | 1207 kPa |
| Výška otvoru nad zemí | 0 m |

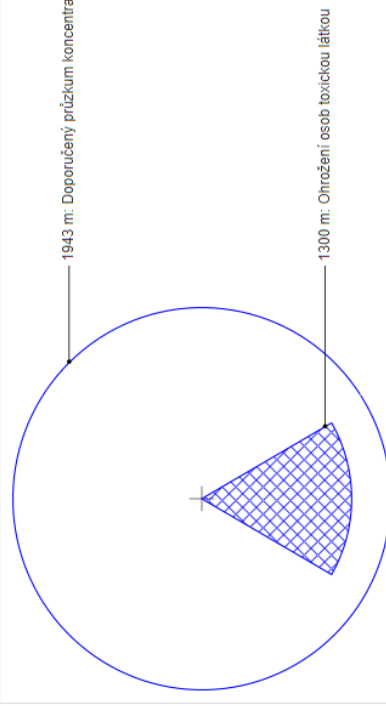
Výsledek výpočtu

| | |
|--|--------|
| Ohrožení osob toxickou látkou | 1300 m |
| [Konzentrace: 29 mg/m ³] | |
| Doporučený průřez koncentrace plynu | 1943 m |
| [Konzentrace: 14,5 mg/m ³] | |

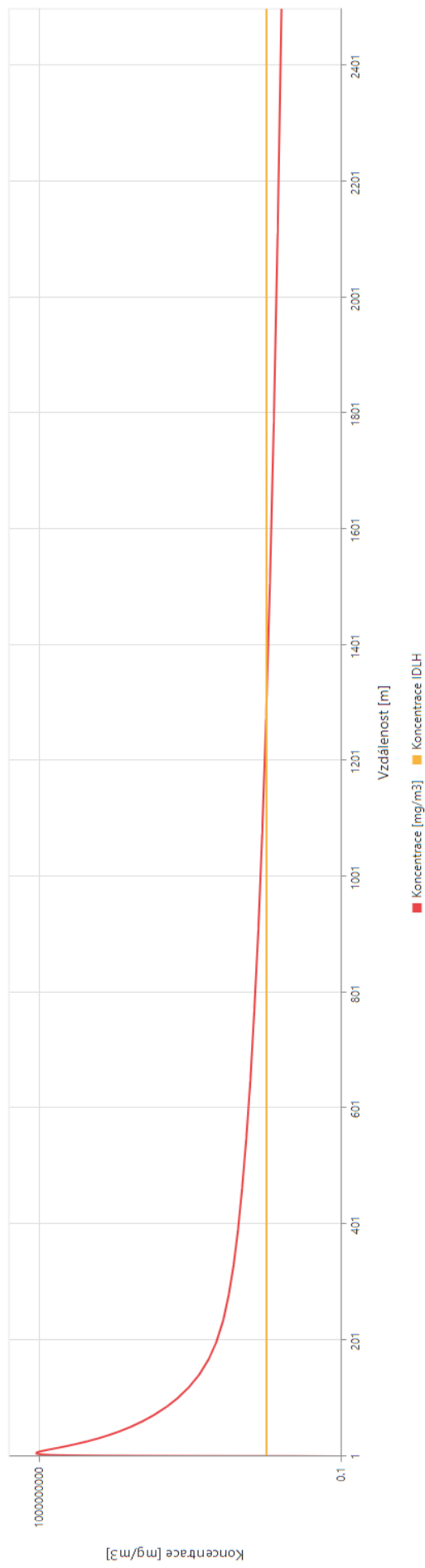
Doporučený průřez koncentrace plynu

EVAKUACE DO VZDÁLENOSTI 1943 m

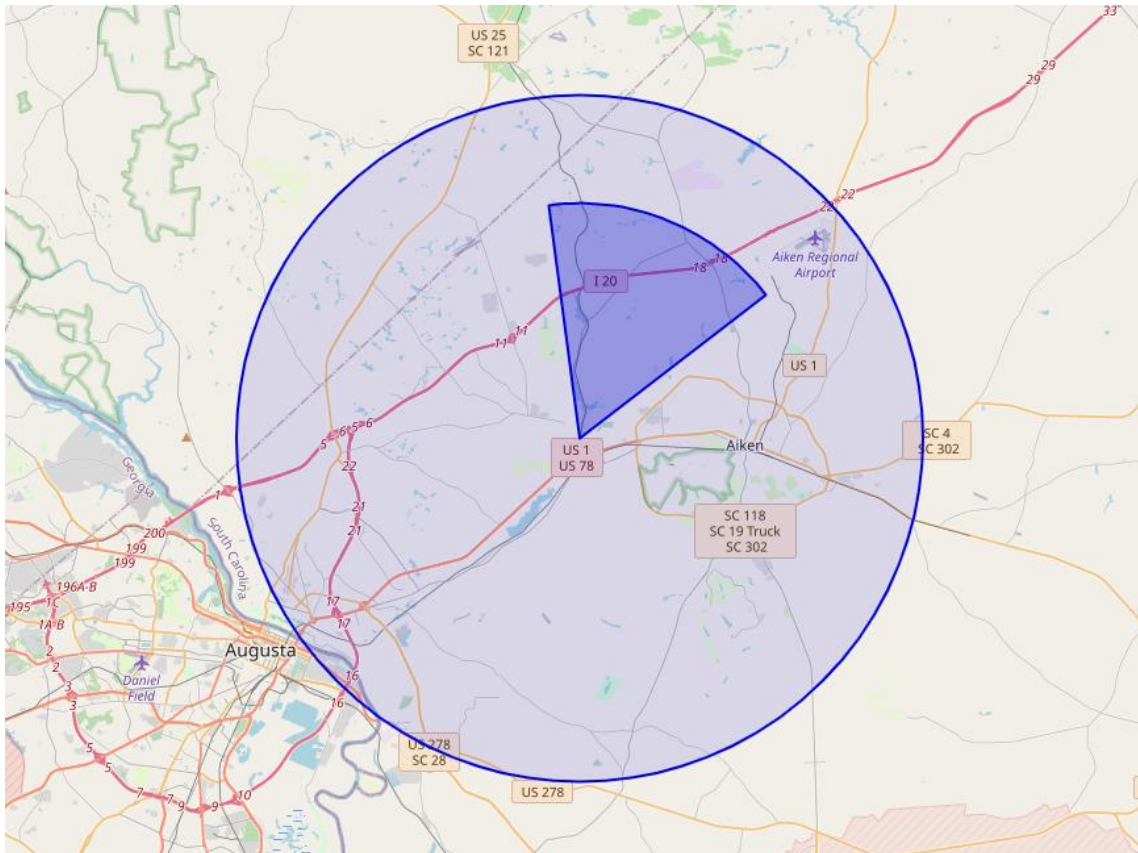
Typ stopy



Doporučený průzkum



Příloha 5: Výstupy modelací dopadů havárie ve městě Graniteville dle softwarového nástroje TerEx a ALOHA (Zdroj: TerEx, ALOHA)

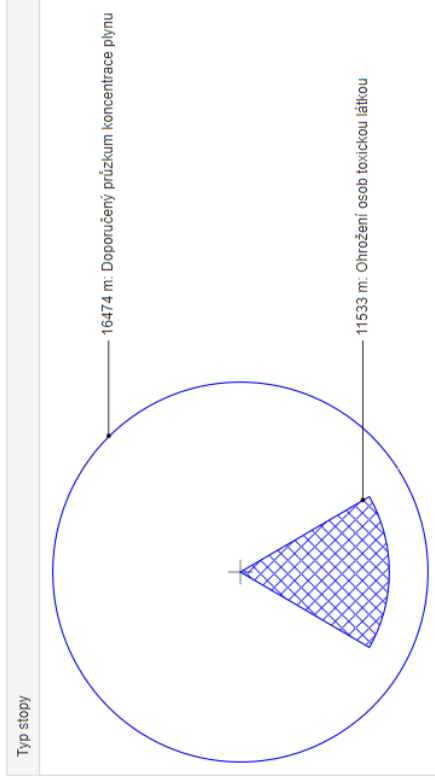


DEGAS - rozptyl těžkých plynů

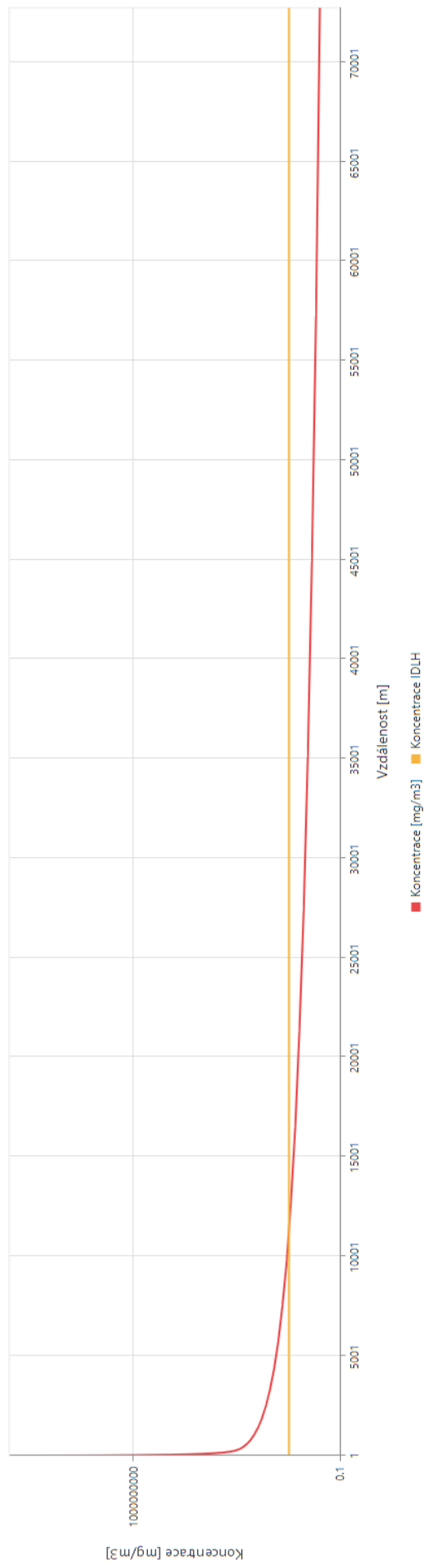
| Vstupní parametry | |
|-----------------------------------|----------------------------------|
| Látka | chlór |
| Výška měření větru/teploty | 10 m |
| Teplota vzduchu | 13 °C |
| Rychlost větru | 3,13 m/s |
| Relativní vlhkost | 99 % |
| Zatáženo | 0 % |
| Doba vzniku | Noc, ráno nebo večer |
| Typ atmosférické stálosti | Inverze - velmi stabilní |
| Typ povrchu ve směru šíření látky | Obytná krajina |
| Typ rozptýlu | Horizontální tryskový únik (let) |
| Teplota látky | -34 °C (po přepočtu) |
| Rychlost úniku látky | 178,710667031224 kg/s |
| Plocha otvoru | 0,1096 m ² |
| Trvání úniku | 34 s |
| Přelak látky | 621 kPa |
| Výška otvoru nad zemí | 0 m |

| Výsledek výpočtu | |
|--------------------------------------|---|
| Ohrožení osob toxickou látkou | 11533 m [Konzentrace: 29 mg/m ³] |
| Doporučený průzkum koncentrace plynu | 16474 m [Konzentrace: 14,5 mg/m ³] |

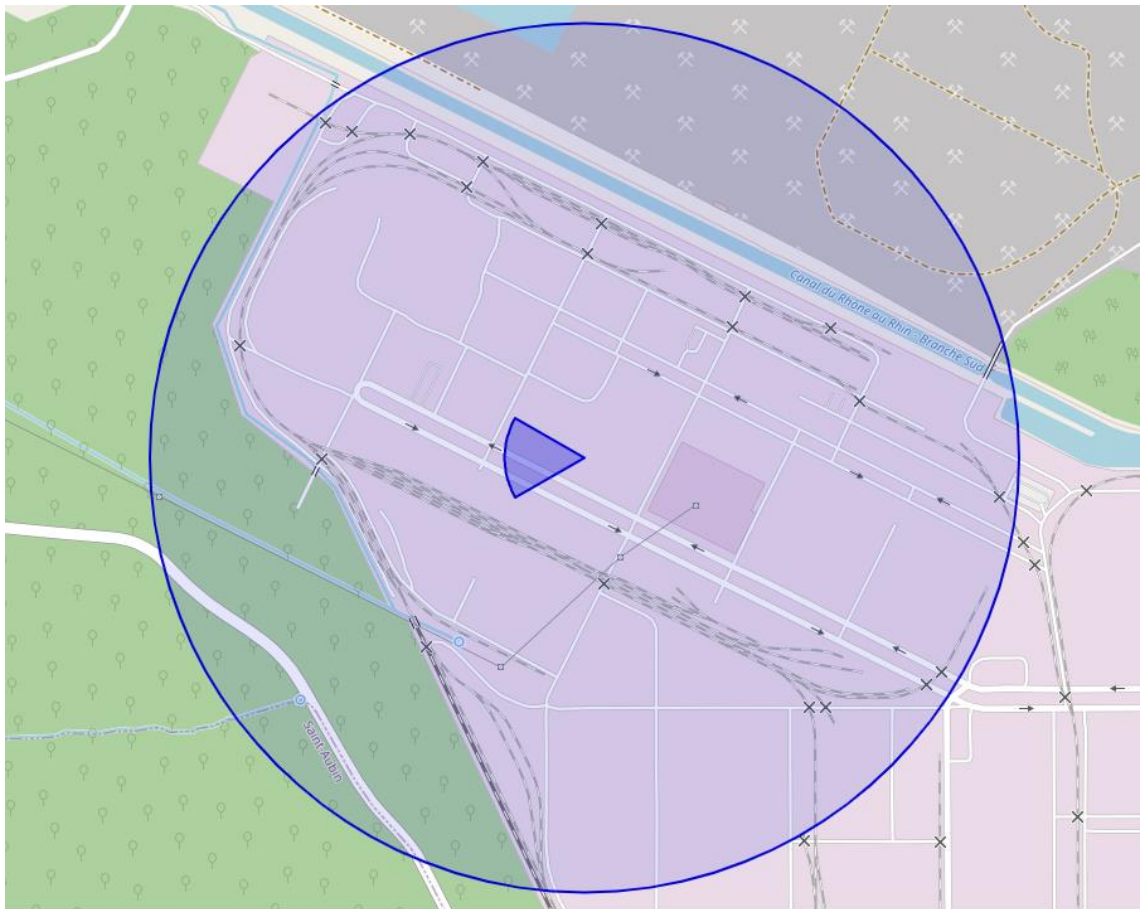
| Doporučený průzkum koncentrace plynu | |
|--------------------------------------|----------------|
| EVAKUACE DO VZDÁLENOSTI | 16474 m |



Doporučený průřez



Příloha 6: Výstupy modelací dopadů havárie ve městě Tavaux dle softwarového nástroje TerEx a ALOHA (Zdroj: TerEx, ALOHA)



DEGAS - rozptyl těžkých plynů

Vstupní parametry

| | |
|-----------------------------------|----------------------------------|
| Látka | vynylchlorid |
| Výška měření větru/teploty | 3 m |
| Teplota vzduchu | 3 °C |
| Rychlost větru | 1,1 m/s |
| Relativní vlhkost | 99 % |
| Zařazeno | 0 % |
| Doba vzniku | Noc, ráno nebo večer |
| Typ atmosférické stálosti | Inverze - velmi stabilní |
| Typ povrchu ve směru šíření látky | Obytná krajina |
| Typ rozptýlu | Horizontální tryskový únik (jet) |
| Teplota látky | -13,2 °C (po přepočtu) |
| Rychlost úniku látky | 0,129551769254716 kg/s |
| Plocha otvoru | 0,00031 m ² |
| Trvání úniku | 211 s |
| Přetlak látky | 103 kPa |
| Výška otvoru nad zemí | 0 m |

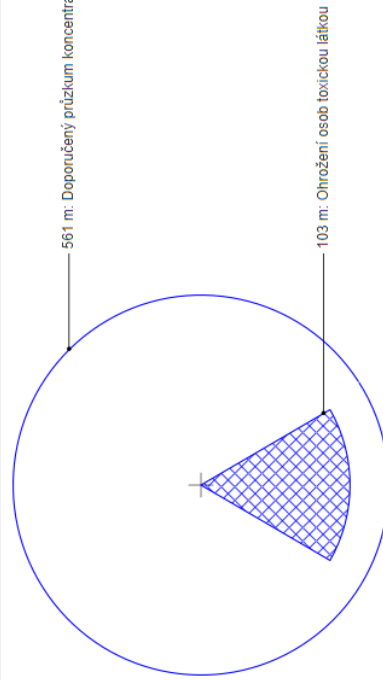
Výsledek výpočtu

| | |
|-------------------------------------|--------------------------------------|
| Ohrožení osob toxickou látkou | 103 m |
| | [Koncentrace: 4,8 g/m ³] |
| Doporučený průřez koncentrace plynu | 561 m |
| | [Koncentrace: 50 mg/m ³] |

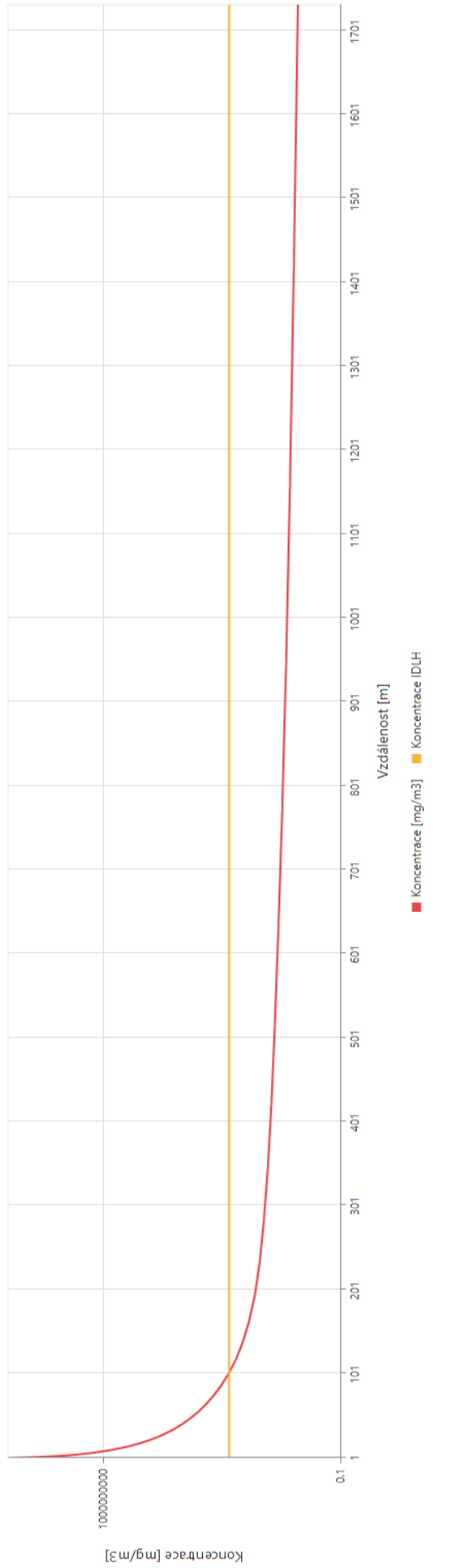
Doporučený průřez koncentrace plynu

EVAKUACE DO VZDÁLENOSTI 561 m

Typ stopy



Doporučený průřez



SITE DATA:

Location: TAVAU, FRANCE
Building Air Exchanges Per Hour: 0.30 (unsheltered double storied)
Time: February 3, 2004 0509 hours DST (user specified)

CHEMICAL DATA:

Chemical Name: VINYL CHLORIDE
CAS Number: 75-1-4 Molecular Weight: 62.50 g/mol
AEGL-1 (60 min): 250 ppm AEGL-2 (60 min): 1200 ppm AEGL-3 (60 min): 4800 ppm
LEL: 36000 ppm UEL: 330000 ppm
Carcinogenic risk - see CAMEO Chemicals
Ambient Boiling Point: -14.6° C
Vapor Pressure at Ambient Temperature: greater than 1 atm
Ambient Saturation Concentration: 1,000,000 ppm or 100.0%

ATMOSPHERIC DATA: (MANUAL INPUT OF DATA)

Wind: 1.1 meters/second from E at 10 meters
Ground Roughness: urban or forest Cloud Cover: 0 tenths
Air Temperature: 3° C Stability Class: F
No Inversion Height Relative Humidity: 90%

SOURCE STRENGTH:

Direct Source: 7.5 kilograms/sec Source Height: 0
Release Duration: 3.52 minutes
Release Rate: 450 kilograms/min
Total Amount Released: 1,584 kilograms
Note: This chemical may flash boil and/or result in two phase flow.

THREAT ZONE:

Model Run: Heavy Gas
Red : 277 meters --- (4800 ppm = AEGL-3 [60 min])
Orange: 485 meters --- (1200 ppm = AEGL-2 [60 min])
Yellow: 865 meters --- (250 ppm = AEGL-1 [60 min])

